

ISSN 0044-4510

Том 163, Выпуск 6

Июнь 2023



**ЖУРНАЛ**  
**ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ**  
*и*  
**ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ**  
**ФИЗИКИ**

[www.sciencejournals.ru](http://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 6

ИЮНЬ 2023

РАН

ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ ПОД РУКОВОДСТВОМ ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК РАН

**СОДЕРЖАНИЕ**

**АТОМЫ, МОЛЕКУЛЫ, ОПТИКА**

- Эффекты конечного времени в одинарном и двойном комптоновском рассеянии ..... Дубрович В. К., Залялютдинов Т. А. 771
- Ionization transition rates in the intermediate regime of the Keldysh parameter for a (0,1)\*LG spiral amplitude modulated laser field ..... Miladinović T. B., Simić S., Danilović N. 779
- Компактный генератор оптической частотной гребенки на основе лазерного диода с распределенной обратной связью и высокочастотного оптического микрорезонатора ..... Ружицкая Д. Д., Воробьев К. А., Булыгин Ф. В., Кузин А. Ю., Миньков К. Н. 786

**ЯДРА, ЧАСТИЦЫ, ПОЛЯ, ГРАВИТАЦИЯ И АСТРОФИЗИКА**

- Caustic-like Structures in UHECR Flux after Propagation in Turbulent Intergalactic Magnetic Fields .... Dolgikh K., Korochkin A., Rubtsov G., Semikoz D., Tkachev I. 792

**ТВЕРДЫЕ ТЕЛА И ЖИДКОСТИ**

- Влияние примесей на адсорбцию кислорода на поверхности  $Ti_5Si_3(0001)$  ..... Бакулин А. В., Чумакова Л. С., Кулькова С. Е. 796
- Акустические солитоны в геликоидах и спиральных нанолентах графена ..... Савин А. В., Савина О. И. 806

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

- Антиферромагнитная модель Поттса на объемно-центрированной кубической решетке ..... Курбанова Д. Р., Рамазанов М. К., Магомедов М. А., Муртазаев А. К. 816

© Российская академия наук, 2023

© Редакция журнала ЖЭТФ (составитель), 2023

Нарушение киральной симметрии и неоднородные состояния в деформированных ферромагнетиках .....	<b>Фраерман А. А.</b>	822
К теории нуклеации ионных солей из водных растворов .....	<b>Вещунов М.С.</b>	830

### ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Индукцированный заряд в дихалькогенидах переходных металлов .....	<b>Терехов И. С.</b>	842
Влияние толщины инкапсулирующих слоев на качество гетероструктур на основе $\text{MoSe}_2$ .....	<b>Бричкин А. С., Голышков Г. М., Черненко А. В.</b>	852
Дипольная плазмонная мода в наноразмерных полупроводниковых квантовых точках типа «ядро-оболочка» с гетеропереходом второго рода .....	<b>Ипатов А. Н.</b>	858

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

Генерация электрического поля в пылевой плазме .....	<b>Смирнов Б. М.</b>	873
Корреляции завихренности внутри когерентного вихря .....	<b>Колоколов И. В., Лебедев В. В., Тумакова М. М.</b>	881
Алфавитный указатель тома 163 за 2023 г. ....		892
Предметный указатель тома 163 за 2023 г. ....		904

# ЭФФЕКТЫ КОНЕЧНОГО ВРЕМЕНИ В ОДИНАРНОМ И ДВОЙНОМ КОМПТОНОВСКОМ РАССЕЯНИИ

*В. К. Дубрович<sup>a</sup>, Т. А. Залялютдинов<sup>b,c\*</sup>*

<sup>a</sup> *Специальная астрофизическая обсерватория Санкт-Петербургского отделения Российской академии наук  
196140, Санкт-Петербург, Россия*

<sup>b</sup> *Санкт-Петербургский государственный университет  
198504, Санкт-Петербург, Россия*

<sup>c</sup> *Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова  
НИЦ «Курчатовский институт»  
188300, Санкт-Петербург, Гатчина, Россия*

Поступила в редакцию 15 июня 2022 г.,  
после переработки 4 октября 2022 г.  
Принята к публикации 1 ноября 2022 г.

Рассмотрен процесс комптоновского рассеяния на свободном электроны с последующим переизлучением одного или двух фотонов в предположении конечного времени взаимодействия. Соответствующие сечения получены в рамках релятивистской квантовой электродинамики с использованием модифицированной формы фермионного пропагатора с комплексным переданным импульсом. Показано, что эффекты конечного времени могут наблюдаться при достаточно низких энергиях рассеянных фотонов. Предлагаемый метод также регуляризует возникающую инфракрасную расходимость в сечении двойного эффекта Комптона. Обсуждается возможная экспериментальная проверка рассматриваемого теоретического подхода.

DOI: 10.31857/S0044451023060019  
EDN: DDJLPX

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В работе рассматривается вывод сечений однократного и двойного комптоновского (ДК) рассеяния в предположении, что падающий фотон взаимодействует с электроном только в течение конечного времени  $\tau$ . В рамках квантовой электродинамики все частицы задаются в виде монохроматических волн, описывающих стабильные частицы, и на сегодняшний день не существует полностью релятивистского подхода для описания процессов рассеяния на конечных временах. Однако попытки сформулировать такую теорию, в частности, для расходящихся во времени волновых пакетов представлены в [1–4]. Целью данной работы является попытка выйти за рамки монохроматического приближения, оставаясь при этом в рамках традиционной теории КЭД, хотя

и с рядом ограничений, вытекающих из такого подхода. Этого можно добиться введением комплексного импульса в амплитуду рассеяния. В качестве примера рассмотрим процессы однократного и двойного комптоновского рассеяния. Последнее представляет особый интерес в связи с известной проблемой инфракрасной расходимости [5], характерной только для монохроматического приближения плоских волн [6]. Правомерность такого подхода можно проверить в экспериментах по рассеянию фотонов на нестабильных частицах или по рассеянию коротких импульсов фотонов на свободных электронах.

Стоит отметить, что явное введение зависящих от времени адиабатических факторов в вершине взаимодействия сразу же делает теорию не лоренц-инвариантной [7]. Это усложняет построение таких величин, как вероятности перехода и сечения рассеяния. Однако здесь оказывается полезным подход, развитый для взаимодействия с нестабильными частицами. Недавно было показано, что для нестабильных фермионных частиц можно ввести следующий модифицированный фейнмановский пропага-

\* E-mail: t.zalialutdinov@spbu.ru

тор [8–11]:

$$S_F(p) = \frac{\hat{p} + m_F - i\Gamma/2}{p^2 - (m_F - i\Gamma/2)^2}, \quad (1)$$

где  $p$  — 4-вектор импульса фермиона,  $m_F$  — масса фермиона,  $\hat{p} = \gamma^\mu p_\mu$ ,  $\Gamma$  соответствует ширине распада частицы и, вообще говоря, может зависеть от переданного импульса  $q$ . В отличие от феноменологического введения множителя  $\Gamma$  в числитель обычного фейнмановского пропагатора [12]

$$S_F(p) = \frac{\hat{p} + m_F}{p^2 - m_F^2 - im_F\Gamma}, \quad (2)$$

представление в уравнении (1) удовлетворяет электромагнитному тождеству Уорда, обеспечивающему калибровочно-инвариантное описание процессов (см. работы [11, 13]).

Параметр  $\Gamma$ , введенный в уравнение (1) и связанный с распадом частиц, подразумевает конечность времени взаимодействия в процессах рассеяния. Соответствующий интервал взаимодействия определяется временем распада фермиона  $\tau = 1/\Gamma$ . В принципе, аналогичным образом можно ввести локализованные во времени эффекты для рассеяния стабильных частиц. Тогда соответствующий параметр  $\Gamma$  в уравнении (1) можно связать с длительностью лазерного импульса  $\tau_L$ . Эта картина может быть верна для одиночного квазимонохроматического фотона с убывающими энергиями, намного превышающими ширину монохроматичности фотона. Без ограничения общности мнимую добавку к импульсу, передаваемому от фотона фермиону, можно отнести либо к времени жизни нестабильной частицы, либо к времени взаимодействия (обратной ширине) квазимонохроматического фотона со стабильным фермионом.

Следует отметить, что точно такая же ситуация возникает в атомной физике при рассеянии фотонов на связанном электроном. В этом случае параметр  $\Gamma$  соответствует естественной ширине атомного уровня, которая может быть строго введена в рамках КЭД-теории профиля линии или в рамках квантовомеханического описания квазистационарных состояний [14, 15]. Однако, в отличие от КЭД во внешних полях, малая мнимая добавка к энергии свободного стабильного фермиона может быть введена только феноменологически. С такими ограничениями и с использованием пропагатора в виде (1) мы пытаемся построить сечение рассеяния квазимонохроматического фотона на свободном фермионе.

Работа построена следующим образом. В разд. 2 представлен полностью релятивистский КЭД-вывод

сечения однократного комптоновского рассеяния для налетающего квазимонохроматического фотона. Раздел 3 посвящен аналогичному рассмотрению двойного эффекта Комптона. Результаты и обсуждение представлены в разд. 4.

В статье используются релятивистские единицы, где скорость света  $c = 1$  и постоянная Планка  $\hbar = 1$ . Масса электрона  $m_e$  записывается явно. Заряд электрона  $e = -|e|$  связан с константой тонкой структуры  $\alpha$  соотношением  $\alpha = e^2/4\pi$ . Для 4-векторов и тензора используются стандартные обозначения ковариантной (нижний индекс) и контравариантной (верхний индекс) компонент, которые связаны друг с другом метрическим тензором с метрикой Минковского  $g_{\mu\nu} = g^{\mu\nu} = (1, -1, -1, -1)$ , так что, например, для компонент вектора  $a_\mu$ :  $a_\mu = g_{\mu\nu} a^\nu$  (имея в виду здесь и далее соглашение Эйнштейна о сумме). Греческие индексы принимают значения (0, 1, 2, 3), а латинские индексы (1, 2, 3). Произведение  $\gamma^\mu$ -матриц Дирака ( $\mu = 0, 1, 2, 3$ ) с 4-вектором  $a = (a_0, \mathbf{a})$  обозначается как  $\hat{a} = \gamma^\mu a_\mu$ .

## 2. КОМПТОНОВСКОЕ РАССЕЯНИЕ

Мы начинаем со стандартного КЭД-вывода формулы Клейна–Нишины [16] для комптоновского процесса, но с модифицированным пропагатором в форме (1). Соответствующий элемент  $S$ -матрицы для рассеяния одиночных фотонов  $\gamma(k_1) + e^- \rightarrow \gamma(k_2) + e^-$  дается выражением [17, 18]

$$S_{fi}^{(2)} = (2\pi)^4 \delta^{(4)}(p_f + k_2 - p_i - k_1) \times \frac{m_e e^2}{\sqrt{8V^4 E_i E_f \omega_1 \omega_2}} \mathcal{M}(k_1, k_2), \quad (3)$$

где  $p_i = (E_i, \mathbf{p}_i)$ ,  $p_f = (E_f, \mathbf{p}_f)$  — 4-векторы соответственно начального и конечного импульсов электрона,  $k_1 = (\omega_1, \mathbf{k}_1)$  — 4-вектор налетающего фотона с частотой  $\omega_1$  и волновым вектором  $\mathbf{k}_1$ ,  $k_2 = (\omega_2, \mathbf{k}_2)$  — 4-векторы рассеянного фотона, а  $\mathcal{M}$  — фейнмановская амплитуда процесса:

$$\mathcal{M}(k_1, k_2) = \bar{u}(p_f) \{ \hat{\varepsilon}(k_2) S_F(p_i + k_1) \hat{\varepsilon}(k_1) + \hat{\varepsilon}(k_1) S_F(p_i - k_2) \hat{\varepsilon}(k_2) \} u(p_i). \quad (4)$$

В уравнении (4)  $u(p)$  — дираковский спинор для свободного электрона с дираковским сопряжением, определяемым как  $\bar{u}(p) = u^\dagger(p) \gamma_0$ ,  $\gamma^\mu$  — матрицы Дирака,  $\varepsilon(k)$  — 4-вектор поляризации фотона с импульсом  $k$ ,  $S_F$  — фейнмановский пропагатор, определяемый выражением (1). Скорость перехода

в единицу времени в одно определяемое состояние можно найти как [17]

$$w = \frac{|S_{fi}^{(2)}|^2}{T} = V(2\pi)^4 \delta^{(4)}(p_f + k_2 - p_i - k_1) \times \frac{m_e^2 e^4}{4V^4 E_i E_f \omega_1 \omega_2} |\mathcal{M}(k_1, k_2)|^2, \quad (5)$$

где  $T \rightarrow \infty$  — время наблюдения,  $V$  — фазовый объем. Поскольку нас интересует скорость перехода  $dw$  в группу конечных состояний с импульсами в интервалах  $(\mathbf{p}_f, \mathbf{p}_f + d\mathbf{p}_f)$  и  $(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_2 + d\mathbf{k}_2)$ , мы должны умножить уравнение (5) на количество этих состояний, которое есть

$$\frac{V^2 d\mathbf{p}_f d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^6}. \quad (6)$$

При таком выборе нормировки состояний объем  $V$  содержит один рассеивающий центр, а поток падающих фотонов равен  $F = c/V$  ( $c$  — скорость света) [19]. Тогда соответствующее дифференциальное сечение можно найти следующим образом:

$$d\sigma_{sc} = \frac{dw}{F} = \delta^{(4)}(p_f + k_2 - p_i - k_1) \times \frac{m_e^2 e^4}{4E_i E_f \omega_1 \omega_2} |\mathcal{M}(k_1, k_2)|^2 \frac{d\mathbf{p}_f d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^2}. \quad (7)$$

Интегрирование по  $d\mathbf{p}_f$  в уравнении (7) можно выполнить с использованием равенства [17, 20]

$$\frac{d\mathbf{p}_f}{2E_f} = \int d^4 p_f \delta(p_f^2 - m_e^2) H(p_f^0), \quad (8)$$

где  $H$  — ступенчатая функция Хевисайда. После этого уравнение (7) принимает вид

$$d\sigma_{sc} = \delta((p_i + k_1 - k_2)^2 - m_e^2) \theta(m_e + \omega_1 - \omega_2) \times \frac{m_e e^4}{2\omega_1 \omega_2} |\mathcal{M}(k_1, k_2)|^2 \frac{d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^2}. \quad (9)$$

В дальнейшем удобно выбрать систему отсчета, в которой электрон изначально покоится, т. е.  $\mathbf{p}_i = 0$  и  $E_i = m_e$ . Тогда закон сохранения энергии, заданный аргументом дельта-функции в уравнении (9) принимает вид

$$(p_i + k_1 - k_2)^2 - m_e^2 = 2m_e(\omega_1 - \omega_2) - 2\omega_1 \omega_2 (1 - \cos \theta_{12}) = 0, \quad (10)$$

а частота рассеянного фотона  $\omega_2$  может быть выражена через  $\omega_1$  и угол  $\theta_{12}$  между соответствующими

волновыми векторами фотонов  $\mathbf{k}_1$  и  $\mathbf{k}_2$  следующим образом:

$$\omega_2 = \frac{\omega_1}{1 + \frac{\omega_1}{m_e}(1 - \cos \theta_{12})}. \quad (11)$$

Наконец, после суммирования по спину и поляризациям конечных состояний и усреднения по спинам и поляризациям начальных состояний дифференциальное сечение рассеяния принимает вид

$$\frac{d\sigma_{sc}}{d\Omega_2} = \frac{e^4}{16\pi^2} \left(\frac{\omega_2}{\omega_1}\right)^2 X(\omega_1, \omega_2), \quad (12)$$

где введены обозначения

$$X(\omega_1, \omega_2) = \frac{1}{2m_e^2} F(\omega_1, \omega_2) \times \left( \Gamma^4 + 16m_e^2 (\Gamma^2 + 4\omega_1^2) + 16\Gamma^2 m_e \omega_1 \right)^{-1} \times \left( \Gamma^4 + 16m_e^2 (\Gamma^2 + 4\omega_2^2) - 16\Gamma^2 m_e \omega_2 \right)^{-1} \quad (13)$$

и

$$F(\omega_1, \omega_2) = 64m_e (\Gamma^6 (\omega_1 - \omega_2) + 4\Gamma^2 m_e^2 (\omega_1 - \omega_2) (9\Gamma^2 + 4\omega_1^2 + \omega_2^2) + 8m_e^3 (4\Gamma^2 (\omega_1^2 - 4\omega_1 \omega_2 + \omega_2^2) + 5\Gamma^4 + 16\omega_1 \omega_2 (\omega_1^2 + \omega_2^2)) + 128m_e^5 (\Gamma^2 + (\omega_1 - \omega_2)^2) + 128m_e^4 (\omega_1 - \omega_2) (\Gamma^2 - 2\omega_1 \omega_2) + 2\Gamma^4 m_e (\Gamma^2 + 4\omega_1^2 - 6\omega_1 \omega_2 + 4\omega_2^2)). \quad (14)$$

В этих уравнениях частота  $\omega_2$  рассеянного фотона определяется уравнением (11).

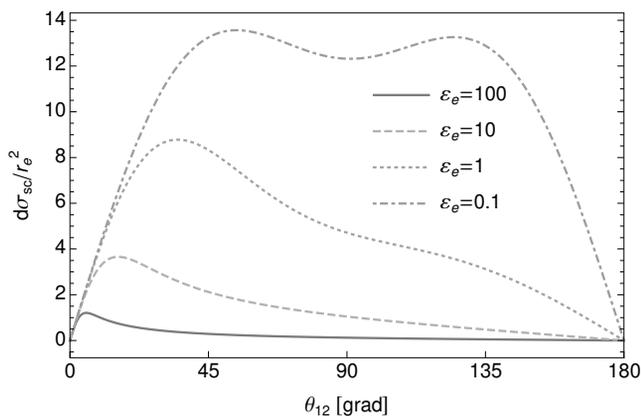
Легко проверить, что в пределе  $\Gamma \rightarrow 0$  формула (12) превращается в обычную формулу Клейна–Нишины для сечения монохроматического комптоновского рассеяния

$$\frac{d\sigma_{sc}}{d\Omega_2} \equiv \lim_{\Gamma \rightarrow 0} \frac{d\sigma_{sc}^\Gamma}{d\Omega_2} = \frac{r_e^2}{2} \left(\frac{\omega_2}{\omega_1}\right)^2 \times \left(\frac{\omega_2}{\omega_1} + \frac{\omega_1}{\omega_2} - \sin^2 \theta_{12}\right), \quad (15)$$

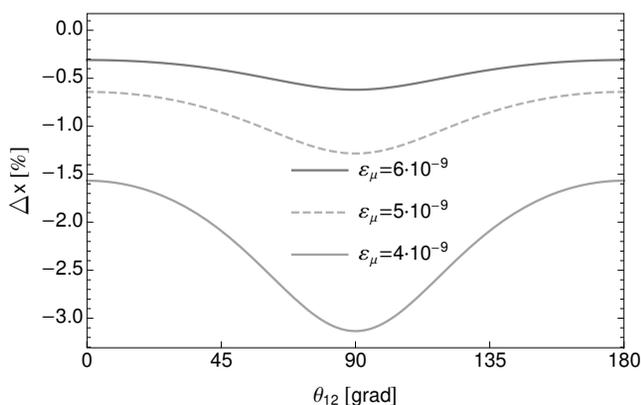
где  $r_e = e^2/(4\pi m_e)$  — классический радиус электрона.

Угловые зависимости обычного комптоновского сечения (15) для разных энергий падающего фотона представлены на рис. 1. Эти результаты можно сравнить с уравнением (12) для конечного параметра  $\Gamma$ . В рамках рассматриваемого подхода, основанного на модифицированной форме фермионного пропагатора, заданного уравнением (1), процесс рассеяния квазимонохроматического фотона шириной

$\Gamma$  на стабильной частице эквивалентен рассеянию монохроматического фотона на нестабильном фермионе с временем жизни  $\tau = 1/\Gamma$ . В качестве примера рассмотрим одиночный комптоновский процесс для мюона с массой  $m_\mu \simeq 207m_e$  и временем распада  $\tau_\mu = 2.197 \cdot 10^{-6}$  с [21]. На рис. 2 представлена относительная разница между обычным и модифицированным комптоновскими сечениями.



**Рис. 1.** Зависимости дифференциального сечения комптоновского рассеяния от угла  $\theta_{12}$  между налетающим и рассеянным фотонами при различных энергиях налетающего фотона (см. уравнение (15)). Здесь  $r_e = e^2/(4\pi m_e)$ . Энергии приведены в единицах масс покоя электрона  $\varepsilon_e \equiv \omega_1/m_e$



**Рис. 2.** Относительная разница  $\Delta x_{rel}$  в процентах между модифицированным и обычным комптоновскими сечениями рассеяния фотонов на свободном мюоне (см. уравнения (12) и (15) соответственно). Здесь  $\varepsilon_\mu \equiv \omega_1/m_\mu$  ( $m_{mu} \simeq 207m_e = 106$  МэВ) и параметр  $\Gamma$  в уравнениях (13), (14) составляет  $\Gamma_\mu = 2.996 \cdot 10^{-10}$  ЭВ

Рассмотрим также нерелятивистский предел приведенных выше уравнений, который соответствует томсоновскому рассеянию. В этом случае  $\omega_1/m_e \ll 1$  и закон сохранения энергии (11) имеет

вид  $\omega_1 \approx \omega_2$ . Затем, установив  $\omega_1 = \omega_2$  в уравнении (15) и выполнив угловое интегрирование, мы получаем [12, 22]

$$\sigma_{Th} = \frac{8\pi}{3} r_e^2. \tag{16}$$

Нас будет интересовать аналогичное выражение, но для конечного параметра  $\Gamma$ . Сохраняя члены порядка  $\Gamma^2$  в уравнении (12), интегрируя по углам и переходя к нерелятивистскому пределу, находим

$$\sigma_{Th}^\Gamma = \frac{\sigma_{Th}}{1 + \Sigma^\Gamma(\omega_1)}, \tag{17}$$

где

$$\Sigma^\Gamma(\omega_1) = 2\pi\Gamma^2 (70m_e^2\omega_1^2 + 120m_e^3\omega_1 + 60m_e^4 + 10m_e\omega_1^3 - 13\omega_1^4) (15m_e^2\omega_1^4)^{-1}. \tag{18}$$

В этом пределе, как и в выражении (12), предполагается, что ширина  $\Gamma$  меньше энергии падающего фотона  $\omega_1$ . Этот результат можно сравнить с полученным из классической электродинамики с учетом эффекта торможения излучением (описываемого некоторым параметром  $\gamma$ ) [23, 24]:

$$\sigma_{Th} = \frac{\sigma_{Th}}{1 + (\gamma/\omega_1)^2}. \tag{19}$$

Из сравнения выражений (17) и (19) следует, что вывод в рамках КЭД приводит к другой степенной зависимости уравнения (17) от частоты налетающего излучения  $\omega_1$ . Важно отметить, что эффекты конечного времени в томсоновском рассеянии ранее не рассматривались в рамках формализма КЭД. Существующие подходы к решению этой задачи относятся только к классической электродинамике. Следует отметить, что в пределе  $\Gamma \rightarrow 0$  в выражении (17) мы сразу приходим к классическому результату (16).

### 3. ДВОЙНОЕ КОМПТОНОВСКОЕ РАССЕЯНИЕ

В этом разделе мы проведем аналогичные расчеты для двойного эффекта Комптона. Сначала напомним краткий вывод сечения рассеяния процесса  $\gamma(k) + e^- \rightarrow \gamma(k_1) + \gamma(k_2) + e^-$  [5, 18]. Следуя [18], двойной эффект Комптона (ДК) описывается элементом  $S$ -матрицы третьего порядка

$$S_{fi}^{(3)} = (2\pi)^4 \delta^{(4)}(p_f + k_1 + k_2 - p_i - k) \times \frac{m_e e^3}{\sqrt{8V^5 E_i E_f \omega \omega_1 \omega_2}} \mathcal{M}(k, k_1, k_2), \tag{20}$$

где  $\mathcal{M}$  — фейнмановская амплитуда процесса:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}(k, k_1, k_2) = & \bar{u}(p_f) \times \\ & \times \{ \hat{\varepsilon}(k) S_F(k - p_f) \hat{\varepsilon}^*(k_1) S_F(k - k_1 - p_f) \hat{\varepsilon}^*(k_2) + \\ & + (1 \leftrightarrow 2) \\ & + \hat{\varepsilon}^*(k_1) S_F(-k_1 - p_f) \hat{\varepsilon}(k) S_F(k - k_1 - p_f) \hat{\varepsilon}^*(k_2) + \\ & + (1 \leftrightarrow 2) + \\ & + \hat{\varepsilon}^*(k_1) S_F(-k_1 - p_f) \hat{\varepsilon}^*(k_2) S_F(-k_1 - k_2 - p_f) \hat{\varepsilon}(k) + \\ & + (1 \leftrightarrow 2) \} \times \\ & \times u(p_i). \end{aligned} \quad (21)$$

В системе отсчета, где электрон изначально покоился, т.е.  $\mathbf{p}_i = 0$  и  $E_i = m_e$ , закон сохранения энергии принимает вид

$$\omega_2 = \frac{m_e(\omega - \omega_1) - \omega\omega_1(1 - \cos\theta_1)}{m_e + \omega(1 - \cos\theta_2) - \omega_1(1 - \cos\theta_{12})}. \quad (22)$$

После суммирования по спину и поляризациям конечных состояний, усреднения по спинам и поляризации начальных состояний и интегрирования по  $\omega_2$  в уравнении (20) дифференциальное сечение принимает вид

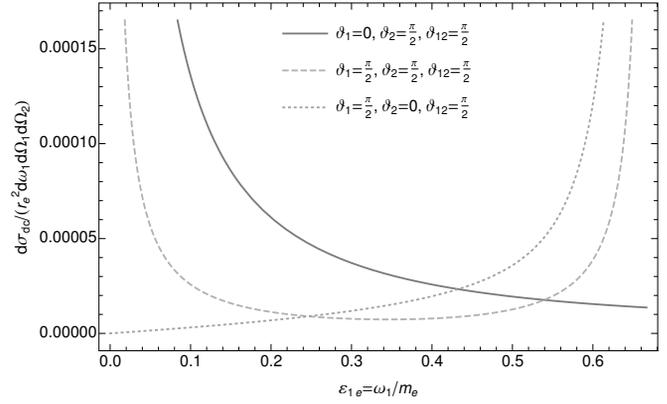
$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_{dc}}{d\omega_1 d\Omega_1 d\Omega_2} = & \frac{m_e e^6 \omega_1}{2^8 \pi^5 \omega} \times \\ \times & \frac{m_e(\omega - \omega_1) - \omega\omega_1(1 - \cos\theta_1)}{(m_e + \omega(1 - \cos\theta_2) - \omega_1(1 - \cos\theta_{12}))^2} X(\omega, \omega_1), \end{aligned} \quad (23)$$

где

$$X(\omega, \omega_1) = \frac{1}{4} \text{Tr} \sum_{\text{polarizations}} |\mathcal{M}(\omega, \omega_1)|^2. \quad (24)$$

Суммирование в уравнении (23) и алгебра с матрицами Дирака могут быть выполнены полностью аналитическим способом с использованием программного пакета FeynCalc [25,26]. Чтобы продемонстрировать зависимость уравнения (23) от параметра  $\Gamma$ , следуем примерам, рассмотренным в [5,18]. На рис. 3 при этом возникают следующие инфракрасные особенности: две для углов  $\theta_1 = \theta_2 = \pi/2$ ,  $\theta_{12} = \pi/2$  при  $\varepsilon_e = 0$  и  $\varepsilon_e = 2/3$ , а для углов  $\theta_1 = \pi/2$ ,  $\theta_2 = 0$ ,  $\theta_{12} = \pi/2$  при  $\varepsilon_e = 0$ .

Чтобы последовательно решить эту проблему, ДК должен рассматриваться вместе с радиационными поправками следующего за ведущим порядка (next-to-leading order, NLO) к однократному процессу Комптона [27,28]. В связи с этим обычно интересуется полное сечение комptonовского рассеяния при порядке  $\alpha^3$ . Поправки NLO содержат логарифмическую расходимость, которая, как можно показать,



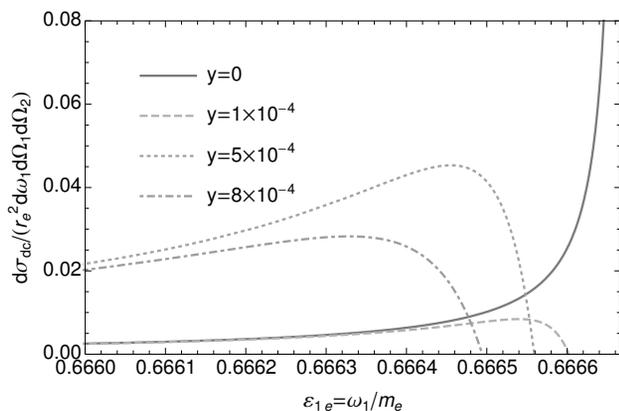
**Рис. 3.** Энергетические спектры сечения двойного комptonовского рассеяния для заданных направлений обоих фотонов. Энергия падающего излучения  $\varepsilon_e = \omega/m_e = 2$  (1 МэВ)

компенсируется соответствующей расходимостью в сечении ДК. При использовании регуляризации — введения массы фотона в стандартный подход [27] — при расчете обоих сечений и их суммировании зависимость от параметров регуляризации исчезает, оставляя конечную радиационную поправку порядка  $\alpha^3$ . Недостатком этого подхода является то, что сечение радиационной поправки теперь зависит от энергетического разрешения эксперимента,  $\omega_{res}$ . Аргумент в пользу суммирования двух процессов заключается в том, что ниже некоторого  $\omega_{res} \ll 1$  эксперимент не может различить вклады от испускания виртуальных фотонов, относящиеся к вычислению NLO-поправки, от реальных вкладов, испущенных в результате процесса ДК-рассеяния. При суммировании всех вкладов в полное сечение комptonовского рассеяния оказалось, что поправка может превышать порядок  $\alpha/\pi$  при достаточно высоких энергиях [29].

Однако все процедуры регуляризации связаны с рассмотрением конечного состояния системы [27]. Альтернативный физический подход к решению этой задачи основан на анализе налетающего фотона — с учетом его локализованности во времени. Действительно, стандартное рассмотрение предполагает, что падающий фотон принимается в виде монохроматической плоской волны, бесконечной во времени и пространстве [17,20,22,72]. Только в этом случае есть возможность сформировать в конце процесса сколь угодно низкочастотный фотон. Однако на самом деле таких волн в природе не существует. Есть только реальные фотоны, которые образуются по какому-то механизму излучения в течение конечного интервала времени [6]. В результате

рассеяние такого фотона на электроне приводит к конечному спектру, который полностью конечен во всем диапазоне частот. Недавно в [31] было показано, что сечение рассеяния для обратного двойного комптоновского (ОДК) процесса не имеет обычной инфракрасной расходимости, связанной с разрешением фотонного детектора в конечных состояниях. Вместо этого сингулярность переносится на энергии налетающих фотонов  $\omega_1$  и  $\omega_2$ , которые являются входными параметрами для дифференциального сечения ОДК. Из рассмотрения инвертированного процесса становится очевидным, что необходимо накладывать ограничения не на разрешающую способность детектора  $\omega_{res}$  (который гипотетически можно сделать сколь угодно чувствительным к низкоэнергетической части спектра ДК), а на источник фотонов. Последнее означает, что падающий фотон действительно следует рассматривать как немонахроматический.

Полезно сравнить поведение дифференциального сечения ДК вблизи сингулярности при конечном параметре  $\Gamma \neq 0$  и в предельном случае  $\Gamma = 0$ . Соответствующие результаты представлены на рис. 4 для  $\varepsilon_e = 2$  (1 МэВ) и углов  $\theta_1 = \theta_2 = \pi/2$ ,  $\theta_{12} = 0$ . Из рис. 4 видно, что в случае  $\Gamma \neq 0$  бесконечный пик, возникающий в результате инфракрасной расходимости, сильно сглаживается.



**Рис. 4.** Энергетические спектры сечения двойного комптоновского рассеяния для заданных направлений обоих фотонов и различных значений параметра ширины в единицах массы покоя электрона  $y = \Gamma / m_e$ . Энергия падения  $\varepsilon_e = \omega / m_e = 2$  (1 МэВ), углы  $\theta_1 = \theta_2 = \pi/2$ ,  $\theta_{12} = 0$ . Сплошная синяя линия уходит в бесконечность при  $\varepsilon_{1e} = 2/3$  (или  $\varepsilon_{2e} = 0$  согласно закону сохранения энергии (11))

#### 4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

В данной работе мы проанализировали эффекты с конечным временем при рассеянии одного или двух фотонов на свободной фермионной частице. Локализованное во времени взаимодействие вводилось малой комплексной добавкой к импульсу фотона (что означает выход за рамки монохроматического плосковолнового приближения). Для этого мы использовали теорию функций распространения неустойчивых фермионов, которые также содержат сложную добавку к импульсу, связанную с временем жизни частицы [11, 12]. При достаточно низких энергиях падающих фотонов, но все же много больших, чем соответствующая ширина импульса, сечения рассматриваемых процессов могут существенно отличаться от стандартного подхода. Выражения, полученные в данной работе, можно применить и к рассеянию фотонов на нестабильных частицах, где время жизни частицы играет роль обратной ширины. Рассмотренный подход также приводит к регуляризации инфракрасной расходимости в сечении двойного эффекта Комптона в полной аналогии с КЭД связанных состояний, где естественная ширина атомного уровня играет роль регуляризующего параметра.

Рассматриваемый в настоящей работе метод регуляризации может быть также применен к однократному и двукратному комптоновскому рассеянию в сильном лазерном поле, широко изучаемому в последние годы [32, 33]. В этом случае внешнее фотонное поле точно учитывается во всех порядках теории возмущений (картина Фарри), а пропагатор свободных электронов заменяется пропагатором электронов в представлении Волкова. Мнимая часть в сингулярных знаменателях может быть введена в этом случае в полной аналогии с процедурой Лоу [34], состоящей в суммировании геометрической прогрессии, возникающей от бесконечного числа самоэнергетических вставок электронов во внутренние электронные линии диаграмм Фейнмана.

Стоит отметить, что в недавней работе [35] обсуждались и другие подходы к введению конечного времени взаимодействия. В частности, в [35] было предложено умножать амплитуду процесса, уравнение (21), на регуляризующий коэффициент, содержащий параметр длительности импульса от источника.

С учетом изложенного выше становится очевидным, что с увеличением чувствительности детекторов к низкоэнергетической части спектра сечение двойного комптоновского эффекта в области мягких

фотонов может быть изучено экспериментально. В частности, прямое наблюдение сглаживания пиков инфракрасной расходимости, см. рис. 4, могло бы подтвердить предложенный теоретический подход. Экспериментальное исследование рассматриваемых эффектов может быть проведено с оптическими фотонами. Для двойного эффекта Комптона это приведет к тому, что переизлученный мягкий фотон окажется в радиочастотном диапазоне, где доступны достаточно чувствительные детекторы.

**Благодарности.** Авторы выражают благодарность В. Залипаеву (Лаборатория квантовых процессов и измерений, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия) и Д. Соловьеву (физический факультет, Санкт-Петербургский государственный университет, Россия) за ценные замечания при обсуждении затронутых в работе проблем.

**Финансирование.** Работа Т. З. поддержана грантом Президента РФ (грант МК-4796.2022.1.2).

## ЛИТЕРАТУРА

1. D. V. Karlovets, *J. High Energy Phys.* **2017** (3), 49 (2017).
2. D. Karlovets, *J. Phys.: Conf. Ser.* **938**, 012031 (2017).
3. D. Krebs, D. A. Reis, and R. Santra, *Phys. Rev. A* **99**, 022120 (2019).
4. K. Nomoto and R. Fukuda, *Progress Theor. Phys.* **86**, 269 (1991).
5. F. Mandl and T. Skyrme, *Proc. Roy. Soc. London, Ser. A Math. Phys. Sci.* **215**, 497 (1952).
6. J. F. Dawson and Z. Fried, *Phys. Rev. D* **1**, 3363 (1970).
7. J. Sucher, *Phys. Rev.* **107**, 1448 (1957).
8. G. L. Castro, J. L. M. Lucio, and J. Pestieau, *Mod. Phys. Lett. A* **6**, 3679 (1991).
9. G. L. Castro, J. L. M. Lucio, and J. Pestieau, *Int. J. Mod. Phys. A* **11**, 563 (1996).
10. M. Nowakowski and A. Pilaftsis, *Z. Physik C Particles and Fields* **60**, 121 (1993).
11. V. Kuksa, *Adv. High Energy Phys.* **2015**, 490238 (2015).
12. S. Weinberg, W. S, and T. de Campos, *The Quantum Theory of Fields, Vol. 2: Modern Applications*, Cambridge Univ. Press (1995).
13. V. I. Kuksa, *Phys. Particles Nuclei* **45**, 568 (2014).
14. O. Y. Andreev, L. N. Labzowsky, G. Plunien, and D. A. Solovyev, *Phys. Rep.* **455**, 135 (2008).
15. T. A. Zaliutdinov, D. A. Solovyev, L. N. Labzowsky, and G. Plunien, *Phys. Rep.* **737**, 1 (2018).
16. O. Klein and Y. Nishina, *Z. Physik* **52**, 853 (1929).
17. J. D. Bjorken and S. D. Drell, *Relativistic Quantum Mechanics*, McGraw-Hill College (1964).
18. J. M. Jauch and F. Rohrlich, *The Relativistic Quantum Field Theory of Charged Particles with Spin One-half (Texts and Monographs in Physics)*, Springer, Berlin (1976).
19. Л. П. Рапопорт, Б. А. Зон, Н. Л. Манаков, *Теория многофотонных переходов в атомах*, Атомиздат, Москва (1978).
20. A. I. Akhiezer and V. B. Berestetskii, *Quantum Electrodynamics*, Wiley-Interscience, New York (1965).
21. E. Milotti, *Atom. Data Nucl. Data Tables* **70**(2), 137 (1998).
22. V. Berestetskii, E. Lifshits, and L. Pitaevskii, *Quantum Electrodynamics*, Oxford Butterworth-Heinemann (1982).
23. T. Heinzl and A. Ilderton, arXiv:1307.0406.
24. J. Schwinger, L. Deraad, K. Milton, W. Tsai, and J. Norton, *Classical Electrodynamics*, Advanced Book Program, Avalon Publ. (1998).
25. R. Mertig, M. Böhm, and A. Denner, *Comp. Phys. Commun.* **64**, 345 (1991).
26. V. Shtabovenko, R. Mertig, and F. Orellana, *Comp. Phys. Commun.* **7**, 432 (2016).

27. L. M. Brown and R. P. Feynman, *Phys. Rev.* **85**, 231 (1952).
28. A. Ravenni and J. Chluba, *J. Cosmol. Astropart. Phys.* **2020**, 25 (2020).
29. K. J. Mork, *Phys. Rev. A* **4**, 917 (1971).
30. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*, Pergamon Press (1965).
31. V. Dubrovich and T. Zaliutdinov, *Physics* **3**, 1167 (2021).
32. V. Dinu and G. Torgrimsson, *Phys. Rev. D* **99**, 096018 (2019).
33. V. Dinu, T. Heinzl, and A. Ilderton, *Phys. Rev. D* **86**, 085037 (2012).
34. F. Low, *Phys. Rev.* **88**, 53 (1952).
35. E. Lötstedt and U. D. Jentschura, *Phys. Rev. A* **80**, 053419 (2009).

# IONIZATION TRANSITION RATES IN THE INTERMEDIATE REGIME OF THE KELDYSH PARAMETER FOR A (0,1)\*LG SPIRAL AMPLITUDE MODULATED LASER FIELD

*T. B. Miladinović<sup>a\*</sup>, S. Simić<sup>b</sup>, N. Danilović<sup>b</sup>*

<sup>a</sup> *Institute for Information Technologies, University of Kragujevac  
34000 Kragujevac, Serbia*

<sup>b</sup> *Faculty of Science, University of Kragujevac  
34000 Kragujevac, Serbia*

Received January 01, 2023,  
revised version January 01, 2023,  
Accepted for publication January 25, 2023

**DOI:** 10.31857/S0044451023060020

**EDN:** DDLKRB

One of the most probable processes occurring during the interaction of matter with strong laser fields is ionization and a detailed understanding of this process is important to control the dynamics of the newly formed quantum-mechanical systems [1, 2]. The ionization process considers the weakest bound electron which can be freed and moved into a continuum when the laser provides enough energy by adjusting its frequency and intensity [3–6]. Several theories have been developed that provide physical insight into multiphoton and tunnel ionization processes [7–9]. Keldysh [7] showed that multiphoton and tunnel ionization is two boundary cases of the same universal ionization process, determined by three parameters: laser frequency  $\omega$ , the value of the electric field  $F$  and ionization potential  $I_p$ . The separation line between these two ionization mechanisms can be defined using the so-called adiabatic parameter, also known as the Keldysh parameter  $\gamma = \omega\sqrt{2m_e I_p}/(eF)$ . For the weak laser fields, the Keldysh parameter has a large value,  $\gamma \gg 1$  and then the multiphoton ionization (MPI) becomes possible, for the strong fields,  $\gamma \ll 1$  and consequently corresponds to the tunneling ionization (TI) process. Despite these, it has been noticed that these boundaries did not so strict [10–13], and often were interpreted as  $\gamma > 1$  and  $\gamma < 1$  [14]. For  $\gamma > 1$ , tunnel ionization is not impossible, but it is only less probable. It can be considered that with increasing this parameter, ionization can occur through both mechanisms in such a way that

the dominant mechanism is transitioned from TI to MPI. Since the value of the gamma parameter is determined by a set of laser parameters, and by careful selection of those parameters, the photon energy can be in the X-ray region, and then the Keldysh parameter reaches the value of  $\gamma \approx 30–100$  [15, 16]. In a study that  $\gamma \gg 1$  can also be performed by adjusting the laser pulse duration, Topcu and Robicheaux investigated the ionization rate for the value of  $\gamma \leq 60$  [17].

In the study of the multiphoton and the tunnel ionization, besides the field strength and pulse duration, the type of polarization of laser light is also important, and numerous theoretical and experimental papers dealt with the influence of the linear, circular and elliptical polarization of laser pulse on these processes [18–20]. Meanwhile, in recent years, greater attention is directed toward radially polarized light, so numerous applications in optical trapping [21], sharp focusing [22], optical lithography [23] and particle acceleration [24, 25] were found. Radially polarized beams have a Laguerre Gaussian (LG) ring intensity distribution with a polarization singularity at the centre and can be created by direct emission from a suitable laser or by manipulating a linearly polarized, lowest-order Gaussian beam. Depending on the required characteristics of the beam, the radial LG beam can be efficiently converted into a fundamental Gaussian beam and vice versa [26, 27]. By implementing and combining a Spatial Light Modulator (SLM) and interferometric technique in the laser system, complex surface patterning of LG beams can generate and create the logarithmic spiral [28].

\* E-mail: tanja.miladinovic@uni.kg.ac.rs

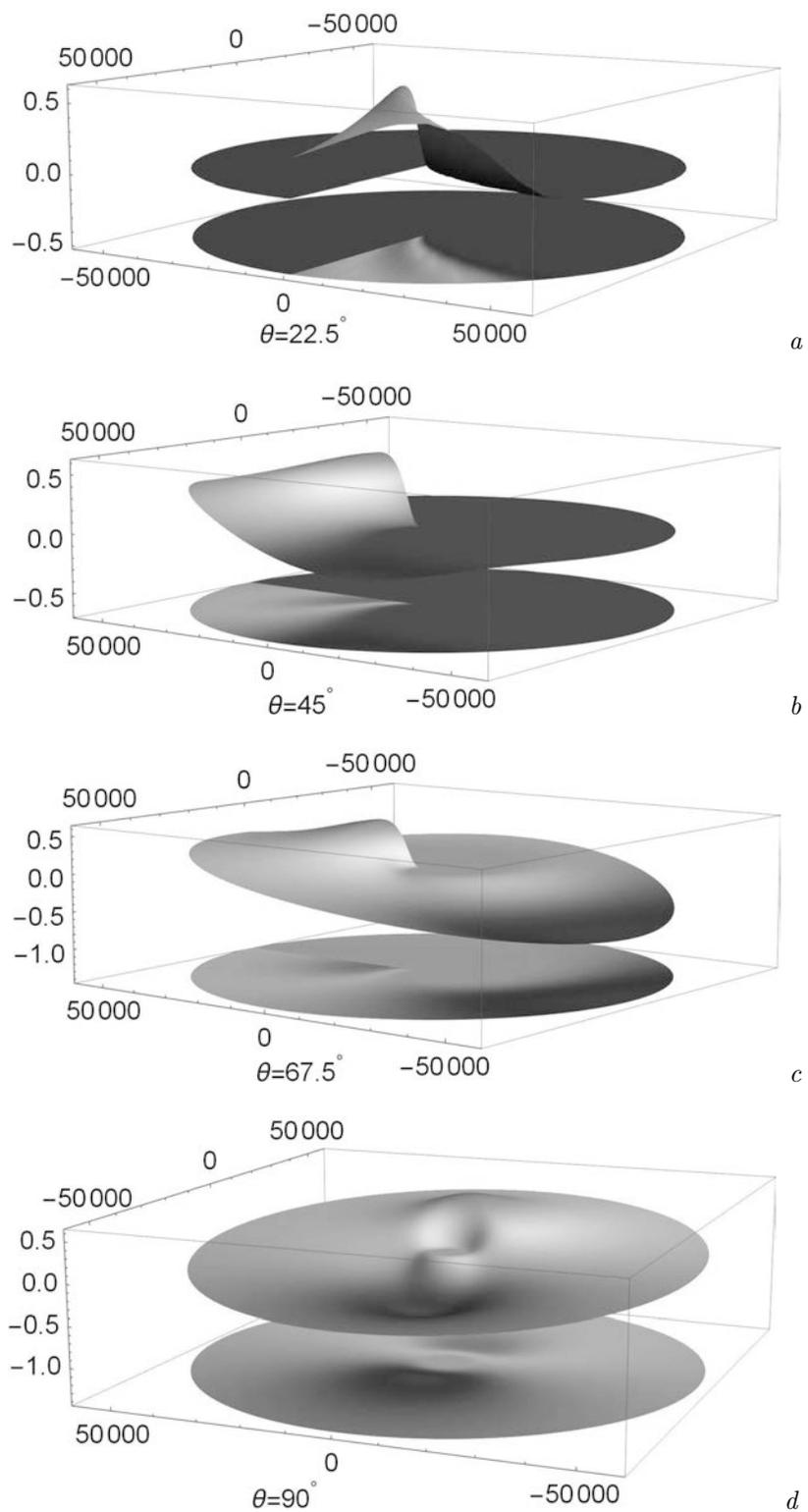


Fig. 1. Electric field distribution  $F^{sp}(r, \phi)$  obtained for different angle  $\theta$ :  $\theta = 22.5^\circ$  (a),  $45^\circ$  (b),  $67.5^\circ$  (c),  $90^\circ$  (d)

In this paper, direct ionization of valence electrons is considered when electrons leave an atom and enter directly into the continuum. As the target, the potassium atom is chosen for the reason that ADK formalism is fully compatible with hydrogen-like atoms and the argon atom, a widely used rare-gas atom, which has ionization energy similar to a hydrogen atom. Transition ionization rates of the TI and MPI processes, as well as the total transition rate in the case when ionization occurs due to the combination of these two processes (intermediate regime), were calculated. The results are analyzed and present that an intermediate regime appears at different values of the Keldysh parameter  $\gamma$ , with significant differences (several orders of magnitude) of the transition rates. The calculations were performed for the linearly polarized (0,1)\*LG laser beam with spiral amplitude modulation in a quite wide range of intensities. The Stark effect and the ponderomotive potential and their effect on the transition rate in the case of this particular laser beam profile are also included in the study. Throughout this paper, all quantities that describe the target and laser field are given in atomic units  $|e| = m_e = \hbar = 1$ .

The parameter  $\gamma$  is defined in such a way that TI and MPI processes are specified as two boundary cases corresponding  $\gamma \ll 1$  and  $\gamma \gg 1$ , respectively, and most experiments are performed within these frames [30, 31]. Therefore, it is interesting to study the ionization process in the intermediate regime where both TI and MPI contribute. In this regime, it is hard to explicitly determine which of the ionization mechanisms has a dominant role, only it is expected that  $\gamma > 1$ . In this particular case it is necessary to use the total transition rate equation  $w_{tot}(F, \omega)$  which can be represented as the sum of two Gaussian functions,  $f_{tot} = a_{TI, MPI} \exp(-(x - b_{TI, MPI})^2 / c_{TI, MPI}^2)$ . This type of simulation is justified because each of the transition rates, both TI and MPI, calculated individually had a Gaussian shape. This total function has six variables:  $a_{TI, MPI}$  the heights of the Gaussian functions,  $b_{TI, MPI}$  the positions of maximum values,  $c_{TI, MPI}$  widths of two Gaussian functions.

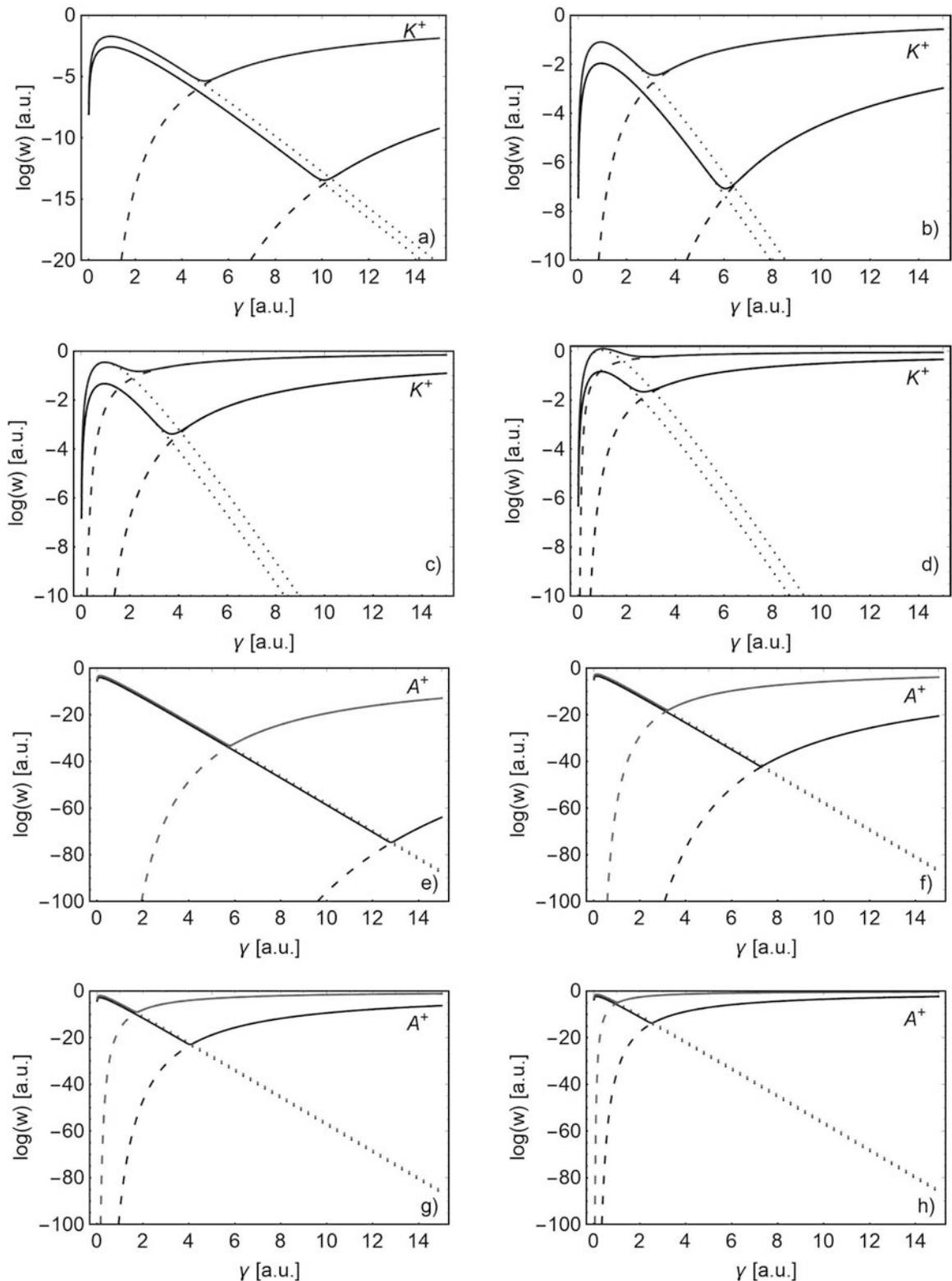
The constant strong external field produces a Stark shift of atomic levels, change effectively the electron ionization potential  $I_p$ . Shifting of energy levels deepens the potential barrier and makes it more difficult for atoms to ionize. The energy of the displacement can be calculated as  $\delta E = -\alpha F^2 / 4$  [32, 33], where  $\alpha$  is the static polarizability of the atom [34]. A significant modification of the ionization potential occurs when the average energy of a free electron oscillating in the electric field,  $U_p = F^2 / (4\omega^2)$  [35] is accounted.  $U_p$  is

intensity-dependent ponderomotive energy and has a much higher value than the ionization potential. Including this value in the calculation affects the probability and rate of the ionization process. The effective ionization potential becomes  $I_p^{eff} = I_p + \delta E + U_p$  [36, 37].

In this paper, the photoionization process in (0,1)\*LG beams also known as "vortex" or "doughnut" beams which are circularly symmetric and directly related to the quantized orbital angular momentum (OAM) of photons [38, 39] and electrons [40], is considered. The amplitude of the laser field strength  $F$  is constant, but adding a second term to the equation leads to a light field with spatially non-uniform amplitude [41], then the (0,1)\*LG spiral amplitude modulated laser field distribution [28] is  $F^{sp}(r, \phi) = F\sqrt{\rho}e^{-\rho/2}e^{\pm i\phi}$ , where  $r$  and  $\phi$  are the cylindrical coordinates, sign  $\pm$  defines beam helicity and  $\rho = 2r^2/R^2$ ,  $R$  is the spot size of the Gaussian beam.  $r(\phi) = ae^{k\phi}$  is a polar equation that gives a curve called the logarithmic spiral [42, 43].  $k, a$  are parameters,  $k = \text{ctg}\theta$  determines the spiral winding, where  $a = 0.57$  (with  $r$  in  $\mu\text{m}$ ). It should be emphasized that the polar equation includes azimuthal ( $\theta = 90^\circ$ ) and radial ( $\theta = 0^\circ$ ) polarization particular cases.

In any beam of light, the energy flux is carried by a Pointing vector. The Pointing vector can be calculated as the vector product of the electric and magnetic fields and always is parallel to the wavevector and perpendicular to the wavefront of the beam [44]. In its most common form, the wavefront of laser light is approximately planar, and the wavevector is directed along the beam axis in the direction of propagation, while the Laguerre-Gaussian beams have intertwined helical wavefronts [45].

In the range of the used intensities, a strong laser field can be treated as a pure electric field, a magnetic field component does not have to be included. Therefore, electric field distribution for (0,1)\*LG with spiral amplitude modulation, when the spiral geometry of the beam determines with different values of angle  $\theta$ , is presented in Fig. 1. It can be seen that the beam has field distribution in the form of a lobe depending on the rotation angle. The obtained results emphasize the complexity of electric fields and the possible impact on ionization processes inducted by a (0,1)\*LG laser field with spiral amplitude modulation. Taking into account that the ionization of the atoms in an alternating field depends on field strength and that the amplitude of the electric component has the form  $F^{sp}(r, \phi)$ , transformed formulas  $I_p^{sp,eff}, w_{TI}^{sp}(F^{sp}, \omega, r, \phi), w_{MPI}^{sp}(F, \omega, r, \phi)$  can



**Fig. 2.** Ionization transition rates, when the field is spiral amplitude modulated:  $w_{tot}^{lin,sp}$  (solid line),  $w_{MPI}^{lin,sp}$  (dashed line),  $w_{TTI}^{lin,sp}$  (dotted line) for potassium represented by blue lines and argon atom by red lines.  $w_{tot}^{lin}$  (solid black line),  $w_{MPI}^{lin}$  (dashed black line),  $w_{TTI}^{lin}$  (dotted black line) represent ionization rates for both atoms for the field without spiral amplitude modulated. Both groups of rates are shown as a function of  $\gamma$  parameter at different laser fields intensities: (a) and (e) — at  $I = 5.2 \cdot 10^{12} \text{ W/cm}^2$ ; (b) and (f) — at  $I = 3.5 \cdot 10^{13} \text{ W/cm}^2$ ; (c) and (g) — at  $I = 2.4 \cdot 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ; (d) and (h) — at  $I = 1.1 \cdot 10^{15} \text{ W/cm}^2$

be used to investigate the effects of the spiral field amplitude which depends on the spatial variables of ionization parameters.

Photoionization transition rates were calculated using the quantities introduced in the text. Ionization of the valence electron of potassium (K) and argon (Ar) atom by Ti: Sapphire linearly polarized (0,1)\*LG laser light at a frequency  $\omega = 0.057$  a.u. ( $\lambda = 800\text{nm}$ ), with and without the spiral amplitude modulation, was observed. Laser intensities were in the range  $I = (10^{12} - 2 \cdot 10^{15}) \text{W/cm}^2$  which corresponds to the field strength of  $F = (0.005 - 0.24)$  a.u., while the ionization potential of valence electron for K-atom  $I_p^K = 4.3406 \text{eV}$  (0.1595 a.u.) and for Ar-atom  $I_p^{Ar} = 15.76 \text{eV}$  (0.5791 a.u.).

Note that a radially polarized beam can produce a much smaller focused spot than a common linear polarized beam [46, 47] and that the diameter of the laser beam can be dimensions from micrometers (3–60)  $\mu\text{m}$  to millimeters (15–30) mm. In our calculations beam diameter is fixed to 3  $\mu\text{m}$  ( $5.7 \cdot 10^4$  in atomic unit),  $a = 0.57$  ( $1.08 \cdot 10^4$  in atomic unit) when  $r$  is in  $\mu\text{m}$ . The constant  $k = \text{ctg } \theta$ , while  $\theta$  angle determines spiral geometry and can take value in the range of  $[-90^\circ, 90^\circ]$ .

TI, MPI and total transition rate were calculated as a function of the  $\gamma$  parameter for various laser intensities (Fig. 2). As can be seen, the total transition rate curve (solid line) has a similar dependence on all four chosen laser intensities. The main characteristic of this curve is that certain values of  $\gamma$  reach a minimum, where the contributions of TI and MPI are equal (hereafter E point). As the laser intensity increases, the position of the minimum shifts to lower  $\gamma$  values. For  $I = 5.2 \cdot 10^{12} \text{W/cm}^2$  (Fig. 2a) the minimum is at  $\gamma \approx 10$  for potassium atom and  $\gamma \approx 13$  for argon atom (Fig. 2e), while for amplitude modulated field these values are  $\gamma \approx 5$  and  $\gamma \approx 6$  for potassium and argon atom respectively. In the case of  $I = 1.1 \cdot 10^{15} \text{W/cm}^2$  (Fig. 2d, h) minimum is at the position of  $\gamma \approx 2$  both for the potassium atom and the argon atom for the unmodulated amplitude, while for the spirally modulated amplitude, the gamma value is slightly shifted towards low gamma values.

It should be emphasized that depending on the laser intensities, the absolute values of the minimum of the total transition rate curve also change. At lower laser intensities, the ratio of minimum and maximum value is more than ten orders of magnitude, while for higher fields this ratio is reduced to two orders of magnitude. It can be seen in the figure that TI is dominant for

lower values  $\gamma$ , so in this region, the total transition rate coincides with the TI transition curve. On the other hand, the total transition rate coincides with the MPI transition rate in the region where with increasing  $\gamma$  the contribution of MPI becomes significant. The obtained results correspond to the fact that, with increasing gamma, the portion of MPI grows, and vice versa. It is known that, when an atom is exposed to a strong laser field, Stark shift of energy levels becomes significant and the electron gains ponderomotive energy  $U_p$ , producing changes in ionization potential  $I_p$ , which then becomes dependent on the laser intensity. It is therefore shown how the effective ionization potential affects the ionization rate of the spiral amplitude-modulated laser field.

**Summary.** We presented a study of the ionization transition rates of potassium and argon atoms in a strong laser field, using the ADK models. We use a linear monochromatic laser source, with a specific (0,1)\*LG spiral amplitude modulation and a broad range of intensities. Our calculation covers a wide range of  $\gamma$  values. From this study, we derived the following conclusions: We confirmed that, for the lower values of the Keldysh parameter ( $\gamma \leq 1$ ), tunnelling ionization dominates over multiphoton ionization. It is additionally shown that, with increasing parameter  $\gamma$ , the multiphoton ionization becomes more significant, as for the values of  $\gamma \geq 3$ , this process presents the main process in the total ionization rate curve, for both atoms. As a consequence of  $\gamma$  dependence, the  $\gamma$  value of the E point moves toward the lower laser intensities. We also found, that the transition rate, at E point, significantly increases for several orders of magnitude with the increase of laser field intensity. We obtained that the influence of the Stark shift and the ponderomotive potential is more noticeable in stronger laser fields, and it is only expressed for the  $\gamma \leq 5$ . The applied model has limitations for the non-relativistic regime, particularly for laser intensities of  $I \leq 10^{18} \text{W/cm}^2$ . However, it gives satisfying results for lower field intensities.

**Acknowledgments.** The authors acknowledge funding provided by the University of Kragujevac, Institute for Information Technologies (the contract 451-03-68/2022-14/200378), University of Kragujevac, Faculty of Science (the contract 451-03-68/2022-14/200122) through the grants by the Ministry of Education, Science and Technological Development of the Republic of Serbia.

*The full text of this paper is published in the English version of JETP.*

## REFERENCES

1. M. Hollstein and D. Pfannkuche, *Phys. Rev. A* **92**, 053421 (2015).
2. K. Hütten, M. Mittermair, S. O. Stock, R. Beerwerth, V. Shirvanyan, J. Riemensberger, A. Duensing, R. Heider, M. S. Wagner, A. Guggenmos, S. Fritzsche, N. M. Kabachnik, R. Kienberger, and B. Bernhardt, *Nat. Commun.* **9**, 719 (2018).
3. G. Mainfray and G. Manus, *Rep. Prog. Phys.* **54**, 1333 (1991).
4. A. Sharma, M. N. Slipchenko, M. N. Shneider, X. Wang, K. A. Rahman, and A. Shashurin, *Sci. Rep.* **8**, 2874 (2018).
5. M. V. Ammosov, P. A. Golovinsky, I. Yu. Kiyani, V. P. Krainov, and V. M. Ristic, *J. Opt. Soc. Am. B* **9**, 1225 (1992).
6. V. S. Popov, *Phys. Usp.* **47**, 855 (2004).
7. L. V. Keldysh, *Sov. Phys. JETP* **20**, 1307 (1965).
8. A. M. Perelomov, V. S. Popov, and M. V. Terent'ev, *Sov. Phys. JETP* **23**, 924 (1966).
9. M. V. Ammosov, N. B. Delone, and V. P. Krainov, *Sov. Phys. JETP* **64**, 1191 (1986).
10. H. R. Reiss, *Phys. Rev. A* **75**, 031404 (2007).
11. X. Hao, Z. Shu, W. Li, S. Hu, and J. Chen, *Opt. Express* **24**, 25250 (2016).
12. D. T. Lloyd, K. O'Keeffe, and S. M. Hooker, *Opt. Express* **27**, 6925 (2019).
13. R. Wang, Q. Zhang, D. Li, S. Xu, P. Cao, Y. Zhou, W. Cao, and P. Lu, *Opt. Express* **27**, 6471 (2019).
14. N. I. Shvetsov-Shilovski, D. Dimitrovski, and L. B. Madsen, *Phys. Rev. A* **85**, 023428 (2012).
15. H. Wabnitz, A. R. B. de Castro, P. Gürtler, T. Laarmann, W. Laasch, J. Schulz, and T. Möller, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 023001 (2005).
16. A. A. Sorokin, S. V. Bobashev, T. Feigl, K. Tiedtke, H. Wabnitz, and M. Richter, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 213002 (2007).
17. T. Topcu and F. Robicheaux, *Phys. Rev. A* **86**, 053407 (2012).
18. C. Wang, X. Lai, Z. Hu, Y. Chen, W. Quan, H. Kang, C. Gong, and X. Liu, *Phys. Rev. A* **90**, 013422 (2014).
19. Y. H. Lai, J. Xu, U. B. Szafruga, B. K. Talbert, X. Gong, K. Zhang, H. Fuest, M. F. Kling, C. I. Blaga, P. Agostini, and L. F. DiMauro, *Phys. Rev. A* **96**, 063417 (2017).
20. L. Guo, S. L. Hu, M. Q. Liu, Z. Shu, X. W. Liu, J. Li, W. F. Yang, R. H. Lu, S. S. Han, and J. Chen, *ArXiv: Atomic Physics* (2019).
21. H. Moradi, V. Shahabadi, E. Madadi, E. Karimi, and F. Hajizadeh, *Opt. Express* **27**, 7266 (2019).
22. S. S. Stafeev, L. O'Faolain, M. I. Shanina (Kotlyar), A. G. Nalimov, and V. V. Kotlyar, *Computer Optics* **38**, 606 (2014).
23. T. Grosjean, D. Courjon, and C. Bainier, *Opt. Lett.* **32**, 976 (2007).
24. C. Varin, S. Payeur, V. Marceau, S. Fourmaux, A. April, B. Schmidt, P-L Fortin, N. Thiré, T. Brabec, F. Légaré, J-C. Kieffer, and M. Piché, *Appl. Sci.* **3**, 70 (2013).
25. M. Wen, Y. I. Salamin, and C. H. Keitel, *Opt. Express* **27** 18958 (2019).
26. D. J. Armstrong, M. C. Phillips, and A. V. Smith, *Appl. Opt.* **42**, 3550 (2003).
27. G. Machavariani, N. Davidson, Y. Lumer, I. Moshe, A. Meir, and S. Jackel, *New Methods of Mode Conversion and Brightness Enhancement in High-Power Lasers*, in: *Proceedings of the Lasers and Electro-Optics and the International Quantum Electronics Conference*, Munich, 17 – 22 June (2007).
28. J. Ouyang, W. Perrie, O. J. Allegre, T. Heil, Y. Jin, E. Fearon, D. Eckford, S. P. Edwardson, and G. Dearden, *Opt. Express* **23**, 12562 (2015).
29. G. S. Voronov and N. B. Delone, *Sov. Phys. JETP* **23**, 54 (1966).
30. M. Uiberacker, Th. Uphues, M. Schultze, A. J. Verhoeft, V. Yakovlev, M. F. Kling, J. Rauschenberger, N. M. Kabachnik, H. Schröder, M. Lezius, K. L. Kompa, H.-G. Müller, M. J. J. Vrakking, S. Hendel, U. Kleineberg, U. Heinzmann, M. Drescher, and F. Krausz, *Nature* **446**, 627 (2007).
31. R. Boge, C. Cirelli, A. S. Landsman, S. Heuser, A. Ludwig, J. Maurer, M. Weger, L. Gallmann, and U. Keller, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 103003 (2013).
32. N. B. Delone, and V. P. Krainov, *Physics- Uspekhi* **42**, 669 (1999).
33. A. Bunjac, D. B. Popovic, and N. S. Simonovic, *ArXiv: Atomic Physics* (2019).
34. J. Mitroy, M. S. Safronova, and Ch. W. Clark, *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* **43**, 20201 (2010).
35. A. Karamatskou, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **50**, 013002 (2017).

36. B. Yang, K. J. Schafer, B. Walker, K. C. Kulander, L. F. DiMauro, and P. Agostini, *Acta Phys. Pol. A* **86**, 41 (1994).
37. E. A. Volkova, A. M. Popov, and O. V. Tikhonova, *J. Exp. Theor. Phys.* **113**, 394 (2011).
38. L. Allen, M. W. Beijersbergen, R. J. C. Spreeuw, and J. P. Woerdman, *Phys. Rev. A* **45**, 8185 (1992).
39. M. Yao and M. J. Padgett, *Adv. Opt. Photon.* **3**, 161 (2011).
40. M. Uchida and A. Tonomura, *Nature* **464**, 737 (2010).
41. S. P. Goreslavsky, N. B. Narozhny, and V. P. Yakovlev, *J. Opt. Soc. Am. B* **46**, 1752 (1989).
42. F. Gori, *J. Opt. Soc. Am. A* **18**, 1612 (2001).
43. J. D. Lawrence, *A Catalog of Special Plane Curves*, Dover, New York (1972).
44. D. K. Cheng, *Field and Wave Electromagnetics*, Addison-Wesley Publishing Company (1989).
45. M. J. Padgett and L. Allen, *Contemp. Phys.* **41**, 275 (2000).
46. R. Dorn, S. Quabis, and G. Leuchs, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 233901 (2003).
47. K. M. Tanvir Ahmmed, C. Grambow, and A. M. Kietzig, *Micromachines* **5**, 1219 (2014).

# КОМПАКТНЫЙ ГЕНЕРАТОР ОПТИЧЕСКОЙ ЧАСТОТНОЙ ГРЕБЕНКИ НА ОСНОВЕ ЛАЗЕРНОГО ДИОДА С РАСПРЕДЕЛЕННОЙ ОБРАТНОЙ СВЯЗЬЮ И ВЫСОКОДОБОТНОГО ОПТИЧЕСКОГО МИКРОРЕЗОНАТОРА

Д. Д. Ружицкая<sup>а</sup>, К. А. Воробьев<sup>а</sup>, Ф. В. Булыгин<sup>б</sup>, А. Ю. Кузин<sup>б</sup>, К. Н. Миньков<sup>а\*</sup>

<sup>а</sup> Российский квантовый центр  
121205, Москва, Россия

<sup>б</sup> Всероссийский научно-исследовательский институт метрологической службы  
119361, Москва, Россия

Поступила в редакцию 28 февраля 2023 г.,  
после переработки 28 февраля 2023 г.  
Принята к публикации 2 марта 2023 г.

Оптические частотные гребенки являются уникальным инструментом для фундаментальной метрологии, спектроскопии, широкого спектра прикладных задач. Перспективной платформой для генерации когерентных частотных гребенок служат высокодобротные микрорезонаторы. В работе предложен подход, основанный на использовании хорошо известного в радиофизике эффекта затягивания, позволяющего создать компактный коммерчески доступный источник оптической гребенки и микроволнового излучения на основе компактного лазерного диода с распределенной обратной связью с малой выходной мощностью 6 мВт и микрорезонатора на основе фторида магния с добротностью  $10^9$ . Продемонстрированы различные режимы генерации оптических частотных гребенок, соответствующие разному количеству генерируемых солитонов при мощности накачки 6 мВт на длине волны 1550 нм, а также спектрально чистое микроволновое излучение на частоте 12.94 ГГц.

DOI: 10.31857/S0044451023060032

EDN: DEAKTR

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы оптические частотные гребенки (ОЧГ) стали важным инструментом научных исследований и основой множества востребованных устройств, созданных на принципах фотоники и радиофотоники. Долгое время для их генерации использовались лазеры с синхронизацией мод [1], что зачастую ограничивало область применения частотных гребенок научной лабораторией. Важным прорывом оказалось обнаруженная возможность использовать для генерации таких сигналов ультракомпактные оптические микрорезонаторы (МШГ) [2]. Маленький размер и высокая плотность оптического поля за счет высокой добротности и наличия области свободной диспер-

сии (ОСД) от единиц до сотен ГГц позволяет использовать микрорезонаторы для компактной интеграции ОЧГ [3]. Более того, был разработан метод генерации когерентных частотных гребенок в виде последовательности диссипативных солитонов [2, 4]. Такие ОЧГ обладают уникальным свойством: они имеют фиксированное расстояние между всеми линиями (за счет фазовой синхронизации всех линий между собой) [5, 6]. К настоящему времени продемонстрирован ряд важных применений на основе микрорезонаторных ОЧГ в области двухгребенчатой спектроскопии [7], систем связи [8, 9], когерентных ЛИДАРов [10], калибровки астрофизических спектрометров [11, 12], сверхмалозумящей микроволновой генерации [5, 6] и фотонных вычислений [13].

В последнее время активно развивается подход к генерации ОЧГ в высокодобротных микрорезонаторах, основанный на применении эффекта затягивания [4, 14–16]. Этот эффект основан на создании частично-селективной оптической обратной связи между микрорезонатором и лазерным диодом,

\* E-mail: k.minkov@rqc.ru

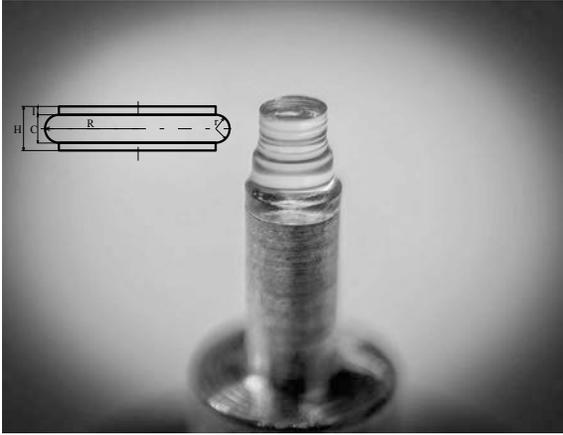


Рис. 1. Фотография микрорезонатора из  $MgF_2$ . На вставке схематично представлена геометрия МШГ-микрорезонатора:  $H$  — высота резонатора,  $R$  — радиус резонатора,  $I$  — отступ от края,  $r$  — радиус закругления резонатора,  $C$  — хорда

которая позволяет значительно уменьшить спектральную ширину линии генерации лазерного диода и, как следствие, фазовый шум лазерного излучения. Как правило, микрорезонаторы для генерации ОЧГ изготавливаются двумя методами: литографическим [17] или путем механической обработки кристаллов [18]. Интегральные микрорезонаторы обладают высокой технологичностью процесса производства, а также малым размером, что приводит к снижению эффективного размера моды и более яркому проявлению нелинейных процессов. Однако такие резонаторы уступают в добротности кристаллическим, значение добротности в которых достигает  $Q = 10^{11}$  [19], а также имеют широкий диапазон прозрачности от ультрафиолетового до дальнего инфракрасного диапазона [20–22]. Поэтому именно использование кристаллических микрорезонаторов позволяет снизить требования к источнику накачки и сделать процесс генерации ОЧГ более доступным. На рис. 1 показан типичный вид кристаллического микрорезонатора из фторида магния, полученный методом алмазного точения [18] с основным набором геометрических параметров.

Применение кристаллических микрорезонаторов с модами шепчущей галереи (микрорезонатор-МШГ) было успешно продемонстрировано в исследованиях [4, 5, 14, 15, 23–25] для стабилизации лазерного излучения и генерации ОЧГ. Так, в работах [14–16, 25] было показано, что стабилизировать излучение лазера и получить ОЧГ возможно при мощностях порядка 100 мВт. Поэтому всегда использовали относительно мощные 100 мВт одно-

частотные и многочастотные лазерные диоды для накачки микрорезонаторов и получения ОЧГ.

Однако, как показано в аналитической теории в работе [14], эффекты затягивания и генерации ОЧГ возможны и при мощностях порядка десятков мВт в зависимости от добротности микрорезонатора. Определяющими параметрами являются диапазон затягивания (1) и ширина затягивания (2) [14]:

$$\frac{\Delta\omega_{lock}}{\omega} = \sqrt{1 + \alpha_g^2 \frac{\Gamma_m}{Q_d}}, \quad (1)$$

$$\frac{\delta\omega}{\delta\omega_{free}} = \frac{(Q_d)^2}{(Q_m)^2} \frac{1}{16\Gamma_m^2(1 + \alpha_g^2)}, \quad (2)$$

где  $\Gamma_m$  — усиление МШГ-резонатора,  $Q_d$  — добротность резонатора лазера,  $Q_m$  — добротность МШГ-резонатора,  $\alpha_g$  — коэффициент усиления,  $\delta\omega/\delta\omega_{free}$  — ширина линии,  $\Delta\omega_{lock}$  — диапазон затягивания. Из формул (1) и (2) видно, что ключевым фактором для появления эффекта затягивания является добротность МШГ-резонатора. Так, применение высокодобротного кристаллического резонатора способно показать сужение линии в 1000 раз, что в свою очередь снижает порог мощности, необходимой для генерации ОЧГ, и, как следствие, становится возможным использование лазерных диодов с малой выходной мощностью для генерации ОЧГ в режиме затягивания.

В настоящей работе продемонстрирована генерация оптической частотной гребенки в микрорезонаторе МШГ на основе фторида магния. Для генерации ОЧГ в качестве источника накачки использовался компактный лазерный диод с распределенной обратной связью и максимальной выходной мощностью 20 мВт, стабилизированный тем же микрорезонатором в режиме затягивания. Впервые генерация ОЧГ была получена при мощности 6 мВт на длине волны 1550 нм при помощи коммерчески доступного диода в оптических кристаллических микрорезонаторах с МШГ. Кроме того, в работе продемонстрирована генерация оптических гребенок в микрорезонаторе в режиме затягивания моды и генерация ОЧГ с 12 ОСД, 4 ОСД, и 1 ОСД, а также микроволновое излучение на частотах 155.28 ГГц, 51.76 ГГц и 12.94 ГГц, соответственно. Подобные спектры ОЧГ могут применяться для спектроскопии в случае, когда оптическая частотная гребенка представлена мощными отдельными линиями [7, 26, 27]. Представленный подход позволяет существенно снизить требования к источнику накачки, ввиду использования компактного и доступного лазерного диода с малой выходной мощностью. Также предложенная

схема обеспечивает миниатюризацию и удешевление системы генерации ОЧГ за счет применения микрорезонатора МШГ на основе фторида магния для стабилизации диода и генерации ОЧГ без введения дополнительных элементов в систему.

## 2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ УСТАНОВКА

Схема эксперимента показана на рис. 2. Высоко-добротный микрорезонатор с модами шепчущей галереи (МШГ), используемый в эксперименте, был изготовлен из фторида магния методом точечного алмазного точения [18]. Диаметр микрорезонатора составлял 5.1 мм, толщина 1 мм, область свободной дисперсии 12.94 ГГц. Измеренная методом звона добротность микрорезонатора в критической связи составила  $Q = 10^9$ .

Для генерации ОЧГ в эксперименте был выбран лазерный диод с распределенной обратной связью и максимальной выходной мощностью 20 мВт. Максимальный ток, подаваемый с источника питания, составлял 60 мА, а центральная длина волны равнялась 1549.6 нм. Для возбуждения МШГ была использована классическая схема с элементом связи (ЭС) в качестве прямоугольной стеклянной призмы БК-7. Излучение лазерного диода коллимировалось на внутреннюю поверхность под углом полного внутреннего отражения [28]. В точке фокусировки образуется выпадающее поле которое необходимо для связи с микрорезонатором [22]. Расстояние от микрорезонатора до ЛД равно двойному фокусному расстоянию фокусирующей линзы (Л), установленной между ЛД и МШГ, и составляет 9 мм. Зазор между резонатором и ЭС контролировался при помощи пьезоподачи. Эффективность связи с микрорезонатором в эксперименте составила 30 %, т. е. максимальная мощность внутри микрорезонатора при максимальной мощности лазерного диода (20 мВт) составила 6 мВт. Отметим, что эффективность связи может быть значительно улучшена путем использования просветленной призмы на рабочей длине волны.

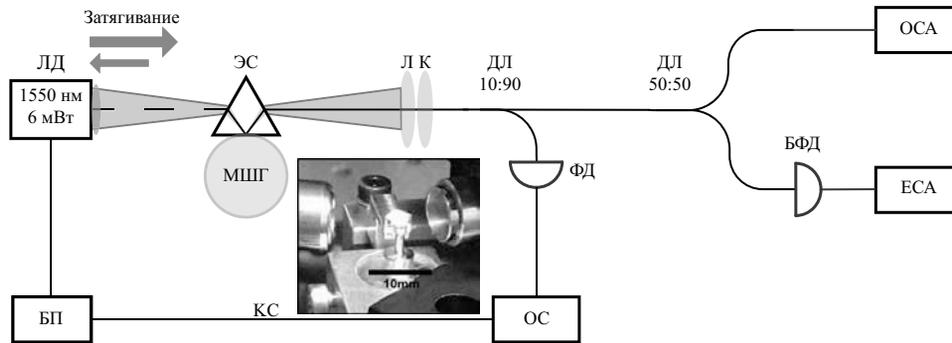
Вышедшее из резонатора излучение делилась на две части при помощи делителя луча (ДЛ): одна проходила на фотодетектор (ФД) Thorlabs PDA50B2 с полосой пропускания 510 кГц и записывалась при помощи осциллографа (ОС) Keysight InfiniiVision MSO-X 4154A с полосой пропускания до 1.5 ГГц, другая поступала на быстрый фотодетектор (БФД) (Newport 1414, полоса пропускания 25 ГГц) и с помощью второго делителя

передавалась на оптический анализатор спектра (ОСА) Yokogawa AQ6370D с диапазоном измерений от 600 до 1700 нм и разрешением 0.02 нм и электронный спектроанализатор (ЕСА) R&S FSW26 с диапазоном измерений от 2 Гц до 26 ГГц.

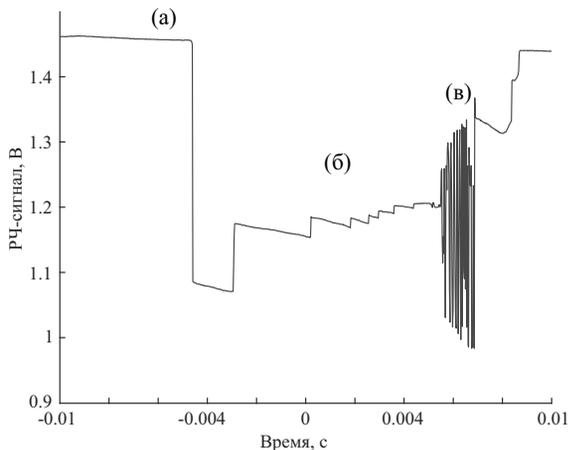
ОЧГ в режиме затягивания генерировались следующим образом. На первом этапе эксперимента мониторился спектр мод микрорезонатора при медленной перестройке (50 Гц) тока лазерного диода внешним генератором для определения соответствующих частот мод. Затем процесс затягивания генерации оптической гребенки осуществлялся на выбранной моде путем синхронизации ее частоты с частотой лазерного диода. На рис. 3 показана характерная резонансная мода микрорезонатора, полученная в режиме затягивания с характерными ступенчатыми состояниями соответствующими различным ОЧГ состояниям [4, 29] при медленной перестройке лазерного диода в окрестностях резонансной моды. Область (а) соответствует свободному излучению диода вне резонансной моды. Далее, по мере приближении частоты диода к частоте резонатора начинает наблюдаться эффект затягивания. Этот процесс сопровождается резкими обрывами в окрестностях резонансной моды, который можно наблюдать на рис. 3. Сама резонансная мода становится прямоугольной. Суммарная ширина затягивания характеризуется уравнением (1) и в нашем случае составляет порядка 1 ГГц. Внутри затянутой моды есть область (б), которая представляет собой генерацию ОЧГ в режиме затягивания, где нет образования солитонных состояний [28]. Область (в на рис. 3 — проявление тепловой нелинейности с последующим переходом в низкошумящее солитонное состояние (ступеньки). После режима тепловой нелинейности наблюдался переход в режим со ступеньками где начинают формироваться солитонные гребенки и солитонные кристаллы [29]. После обнаружения всех режимов генерации ОЧГ внешняя перестройка частоты отключалась. Затем осуществлялся переход в режим затягивания путем изменения тока лазерного диода.

## 3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

В проведенном эксперименте исследованы оптические спектры в зависимости от изменения тока питания лазерного диода и выявлены различные типы спектров в зависимости от области затягивания в которой находится лазерный диод (рис. 3). На рис. 4 представлены полученные ОЧГ в режиме затягива-



**Рис. 2.** Схема экспериментальной установки. ЛД — лазерный диод с распределенной обратной связью, БП — блок питания ЛД, ЭС — элемент связи, МШГ — МШГ-микрорезонатор, Л — линза, К — коллиматор, ДЛ — делитель луча, ФД — фотодетектор, ОС — осциллограф, КС — канал синхронизации, БФД — быстрый фотодетектор, ОСА — оптический анализатор спектра, ЕСА — анализатор спектра радиодиапазона. На вставке показано фото установки



**Рис. 3.** Отклик резонансной моды на осциллографе со ступенчатым переходом в солитонное состояние

ния при средней мощности внутри микрорезонатора 6 мВт. Рисунок 4 а характеризует шумную гребенку с интервалом между линиями 12 ОСД полученный в области затягивания (б) на рис. 3. Данный спектр гребенки характеризуется большей мощностью линий гребенки подробно описанному в работе [30]. Рисунок 4 б, в — это области затягивания (в) на рис. 3, характеризующие генерацию солитонных кристаллов с интервалами 4 ОСД и 1 ОСД, соответственно. Кроме того, получено многосолитонное состояние, представленное на рис. 4 г [4].

На рис. 4 показаны различные оптические спектры гребенок в разных областях затягивания и при разных отстройках лазерного диода от моды микрорезонатора. Эти спектры характеризуются различными формами огибающей, а также мощностью линий гребенки. Относительно более мощные линии гребенки возникают, когда частота генерации при-

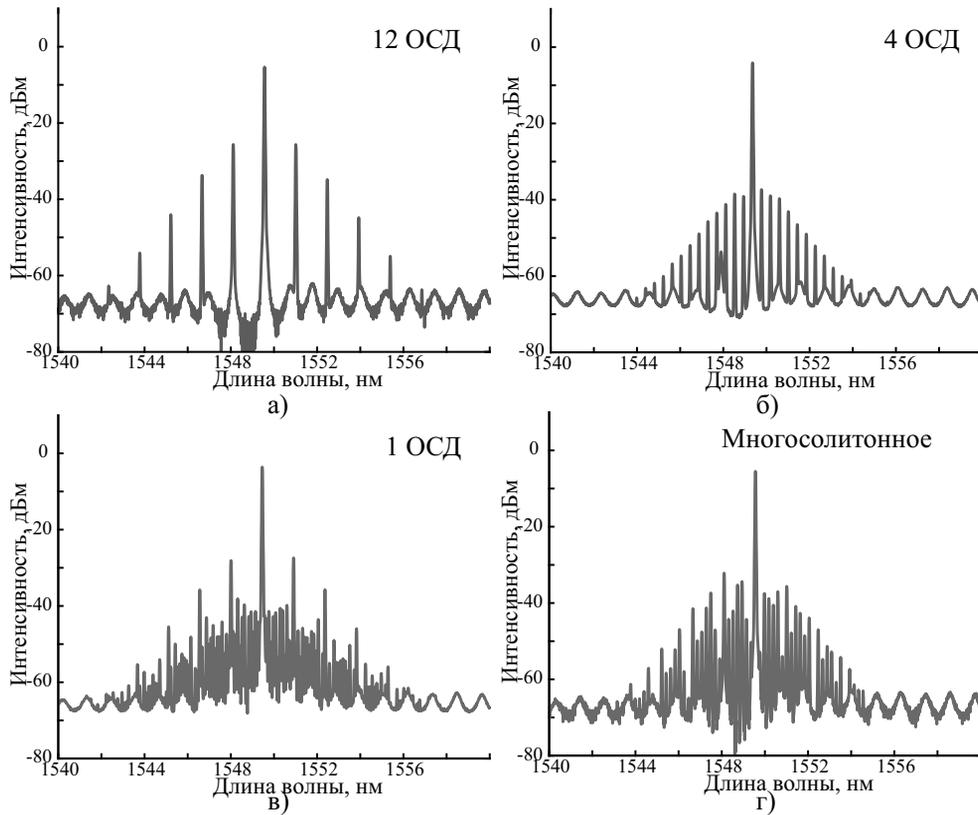
ближается к области тепловой нелинейности [4]. В момент возникновения тепловой нелинейности мы видим мощные линии, затем происходит настройка на солитонные состояния, которые меньше по мощности.

Солитонные состояния повторяемо наблюдались при сканировании тока диода в прямом и обратном направлениях, при стабилизации внешних условий, таких как уровень связи между элементом связи и резонатором, температурной стабильности, в отсутствие акустических помех спектры повторяемы при включении и выключении лазера [31].

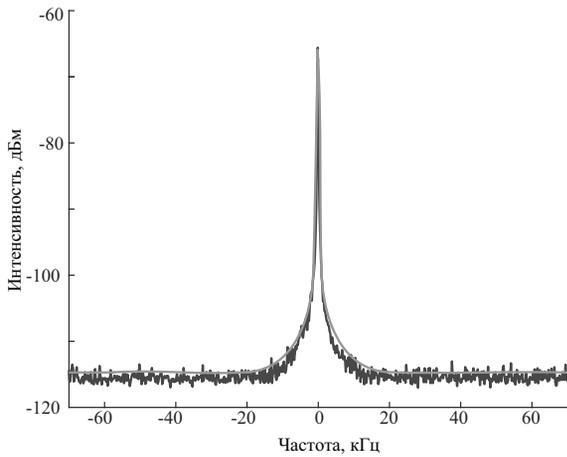
Также дополнительно была измерена микроволновая частота биений линий гребенки путем гетеродинамирования оптического сигнала на быстром фотодетекторе (25 ГГц). На рис. 5. показан сигнал биений линий гребенки, снятый с многосолитонного спектра (рис. 4 з). Данное состояние характеризуется интервалом между линиями гребенки равным 1 ОСД или частоте 12.94 ГГц. Ширина линии полученного излучения, определенная при помощи аппроксимации функцией Лоренца по крыльям линии, составила 2.6 кГц, что подтверждает высокую когерентность и маленькие шумы линий гребенки, а также СВЧ-сигнала. Подобные СВЧ-сигналы также могут наблюдаться на частотах 155.28 ГГц и 51.76 ГГц соответствующих спектрам гребенки на рис. 4 а, б, но из-за ограниченной полосы высокочастотного детектора (Newport 1414, полоса пропускания 25 ГГц) мы не смогли напрямую их наблюдать.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенное исследование впервые показало, что мощность накачки 6 мВт для высокочастотного кристаллического резонатора является доста-



**Рис. 4.** Спектры ОЧГ в режиме затягивания частоты лазерного диода соединенного с МШГ-микрорезонатором из фторида магния: *а* — шумная гребенка с интервалом 12 ОСД, *б*, *в* — спектры с интервалом 4 ОСД и 1 ОСД в области тепловой нелинейности соответственно, *г* — многосолитонное состояние. Детали описания приведены в тексте



**Рис. 5.** Сигнал микроволнового излучения (синяя кривая) на частоте 12.94 ГГц. Красная кривая — аппроксимация функцией Лоренца

точной для генерации оптических частотных гребенок с различными оптическими спектрами: 12 ОСД (155.28 ГГц), 4 ОСД (51.76 ГГц), 1 ОСД (12.94 ГГц). При этом источником накачки является общедо-

ступный маломощный лазерный диод с распределенной обратной связью. Кроме того, в зависимости от сгенерированного спектра, возможно получить соответствующую СВЧ-частоту от биений линий гребенки (155.28 ГГц, 51.76 ГГц, 12.94 ГГц, соответственно). Полученные результаты указывают на то, что солитонные оптические частотные гребенки, полученные на основе микрорезонаторов, могут быть эффективно использованы для ряда сенсорных, телекоммуникационных, метрологических приложений, а также для создания широкого спектра микроволновых импульсов. Полученные гребенки имеют фазовую синхронизацию между всеми линиями, создавая когерентную периодическую последовательность импульсов во всей временной области, обладают беспрецедентно низким уровнем фазовых шумов. Представленные результаты могут сделать существенный вклад в развитие ряда приложений таких как оптическая связь, спектроскопия, синтез частот и микроволновое излучение, за счет удешевления процесса генерации солитонных оптических частотных гребенок.

**Благодарности.** Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП ВНИИОФИ (скр.vniiofi.ru) и ЦКП «Визуализации высокого разрешения» Сколтех (www.skoltech.ru).

**Финансирование.** Работа поддержана Российским научным фондом (проект N 21-72-00132).

## ЛИТЕРАТУРА

1. H. Zang, D. Y. Tang, L. M. Zhao, and H. Y. Tam, *Science*. **33**, 2317 (2008).
2. T. J. Kippenberg, A. L. Gaeta, M. Lipson, and M. L. Gorodetsky, *Science*. **361**, eaan8083 (2018).
3. T. Fortier, and E. Baumann, *Commun. Phys.* **2**, 153 (2019).
4. T. Herr, V. Brash, J. Jost et. al., *Nat. Photon.* **8**, 145 (2014).
5. W. Liang, D. Eliyahu, V. Ilchenko et. al., *Nat Commun.* **6**, 7957 (2015).
6. J. Liu, E. Lucas, A. S. Raja et. al., *Nat. Commun.* **6**, 7957 (2020).
7. M-G. Suh, Q-F. Yang, K. Y. Yang, X. Yi, and K. J. Vahala, *Sci. Adv.* **354**, 600 (2016)
8. P. Marin-Palomo, J. Kemal, M. Karpov et. al., *Nature*. **546**, 7957 (2017).
9. A. Fülöp, M. Mazur, A. Lorences-Riesgo et. al., *Nat. Commun.* **9**, 1598 (2018).
10. J. Riemensberger, A. Lukashchuk, M. Karpov et. al., *Nature*. **581**, 164 (2020).
11. E. Obrzud, M. Rainer, A. Harutyunyan et. al., *Nat. Photon.* **13**, 31 (2019).
12. M-G. Suh, X. Yi, Y. H. Lai et. al., *Nat. Photon.* **13**, 25 (2019).
13. J. Feldmann, N. Youngblood, M. Karpov et. al., *Nature*. **591**, E13 (2021).
14. N. M. Kondratiev, V. E. Lobanov, A. V. Cherenkov et. al., *Opt. Express*. **25**, 28167 (2017).
15. А. Е. Шитков, А. С. Волошин, И. К. Горелов и др., *ЖЭТФ* **161**, 683 (2022) [A. E. Shitikov, A. S. Voloshin, I. K. Gorelov et. al., *JETP* **134**, 583 (2022).]
16. T. J. Kippenberg, R. Holzwarth, and S. A. Diddams, *Science*. **332**, 555 (2011).
17. V. Brasch, M. Geiselmann, T. Herr et. al., *Science*. **351**, 357 (2016).
18. К. Н. Миньков, Г. В. Лихачев, Н. Г. Павлов и др., *Оптический журнал* **86**, 84 (2021) [K. N. Min'kov, G. V. Likhachev, N. G. Pavlov et. al., *J. Opt. Technol.* **88**, 348 (2021).]
19. A. A. Savchenkov, A. B. Matsko, V. S. Ilchenko, and L. Maleki, *Opt. Express*. **15**, 6768 (2007).
20. C. Lecaplain, C. Javerzac-Galy, M. Gorodetsky et. al., *Nat. Commun.* **7**, 13383 (2016).
21. A. A. Savchenkov, S-W. Chiow, M. Ghasemkhani et. al., *Opt. Lett.* **44**, 4175 (2019).
22. М. Л. Городецкий, *Оптические микрорезонаторы с гигантской добротностью*, Физматлит, Москва (2011).
23. W. Liang, A. B. Matsko, A. A. Savchenkov, V. S. Ilchenko, D. Seidel, and L. Maleki, *Generation of Kerr combs in MgF<sub>2</sub> and CaF<sub>2</sub> microresonators*, IEEE, San Francisco (2011).
24. J. D. Jost, E. Lucas, T. Herr et. al., *Opt. Lett.* **40**, 4723 (2015).
25. A. E. Shitikov, V. E. Lobanov, N. M. Kondratiev et. al., *Phys. Rev. Appl.* **15**, 064066 (2021).
26. N. G. Pavlov, G. V. Lihachev, S. Koptyaev et. al., *Opt. Lett.* **42**, 514 (2017).
27. S. B. Papp, K. Beha, P. Del'Haye et. al., *Optica* **1**, 10 (2014).
28. N. G. Pavlov, S. Koptyaev, G. V. Lihachev et. al., *Nat. Photon.* **12**, 694 (2018).
29. M. Karpov, M. H. P. Pfeiffer, H. Guo et. al., *Nat. Phys.* **15**, 1071 (2019).
30. N. Kondratiev, V. Lobanov, N. Dmitriev et. al., ArXiv 2209.03707.
31. R. R. Galiev, N. G. Pavlov, N. M. Kondratiev et. al., *Opt. Express*. **26**, 30509 (2018).

# CAUSTIC-LIKE STRUCTURES IN UHECR FLUX AFTER PROPAGATION IN TURBULENT INTERGALACTIC MAGNETIC FIELDS

*K. Dolgikh*<sup>a,b</sup>, *A. Korochkin*<sup>c,b</sup>, *G. Rubtsov*<sup>a,b</sup>, *D. Semikoz*<sup>d</sup>, *I. Tkachev*<sup>a,b\*</sup>

<sup>a</sup> *Institute for Nuclear Research of the Russian Academy of Sciences  
117312, Moscow, Russia*

<sup>b</sup> *Physics Department and Laboratory of Cosmology and Elementary Particle Physics,  
Novosibirsk State University  
630090, Novosibirsk, Russia*

<sup>c</sup> *Université Libre de Bruxelles  
1050, Brussels, Belgium*

<sup>d</sup> *APC, Université Paris Cité, CNRS/IN2P3, CEA/IRFU,  
Observatoire de Paris  
119 75205, Paris, France*

Received October 20, 2022,  
revised version December 1, 2022  
Accepted for publication December 2, 2022

**DOI:** 10.31857/S0044451023060044  
**EDN:** DEDUQZ

UHECR propagation in a turbulent intergalactic magnetic field in the diffusion regime is well understood for propagation distances much larger than the field coherence scale, see e.g. Refs. [1–4]. The diffusion theory doesn't work and unexpected effects may appear for propagation over smaller distances, from a few and up to 10–20 coherence scales [5–7]. We study the propagation of UHECRs in this regime, which may be relevant for intermediate mass UHECR nuclei and nG scale intergalactic magnetic fields with 1 Mpc coherence scale. We found that the trajectories form a non-trivial caustic-like pattern with strong deviation from isotropy. Thus, measurements of the flux from a source at a given distance will depend on the position of the observer.

In general, deflections of cosmic rays in a turbulent field with coherence length  $\lambda_C$  as a function of distance has three regimes. At  $D < \lambda_C$ , the deflection occurs across the main direction of the magnetic field in the given region. As a result, the deflection grows almost

linearly  $\theta = (D/D_0)^\alpha$  with  $\alpha = 0.9$  in our case. For  $D > 5\lambda_C$  deflections occur in diffuse regime and a typical power law corresponds to  $\alpha = 0.5$ . Therefore, for  $D \gg \lambda_C$  and small deflection angles

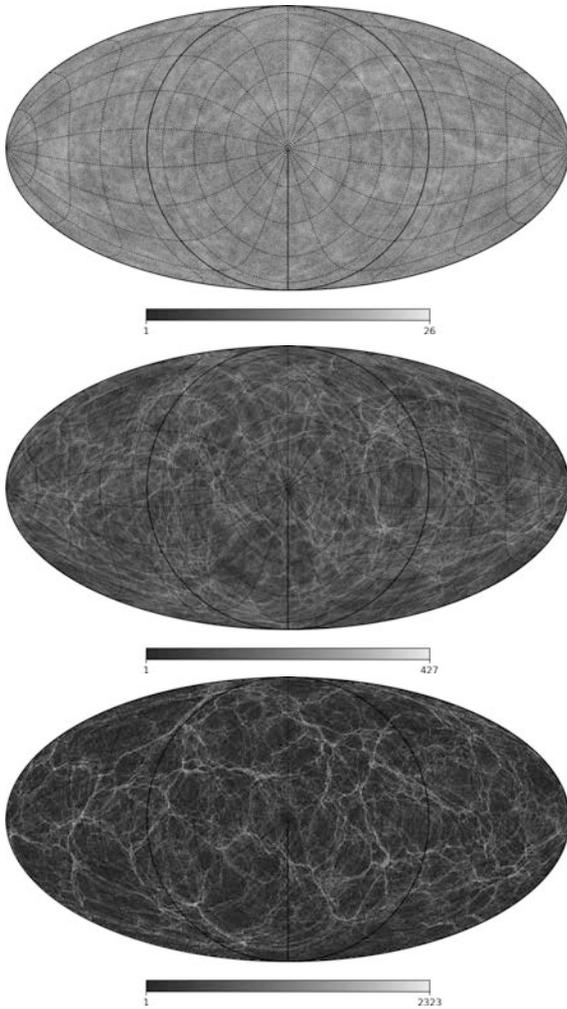
$$\theta \sim 4^\circ Z \frac{B}{\text{nG}} \frac{10 \text{ EeV}}{E} \sqrt{\frac{D}{\text{Mpc}}} \sqrt{\frac{\lambda_C}{\text{Mpc}}},$$

where  $Z$  is the atomic number of the primary particle. Finally, in the intermediate regime  $\lambda_C < D < 5\lambda_C$ , and on average, the exponent  $\alpha$  is interpolated between the above values.

However, averaging can erase important properties of UHECR propagation at a given distance from the source, and two-dimensional slices of the density distribution of cosmic rays propagating from a source have never been studied. In this work, medium-scale anisotropies are revealed in a certain range of parameters in the two-dimensional distribution of cosmic rays on spheres around the source.

The physical reason for the appearance of anisotropies during propagation in a turbulent field can be understood analytically. In [6] it is shown that in the case of initially parallel proton beam, inhomogeneities in the particle distribution are caused

\* E-mail: tkacheff.igor2015@yandex.ru

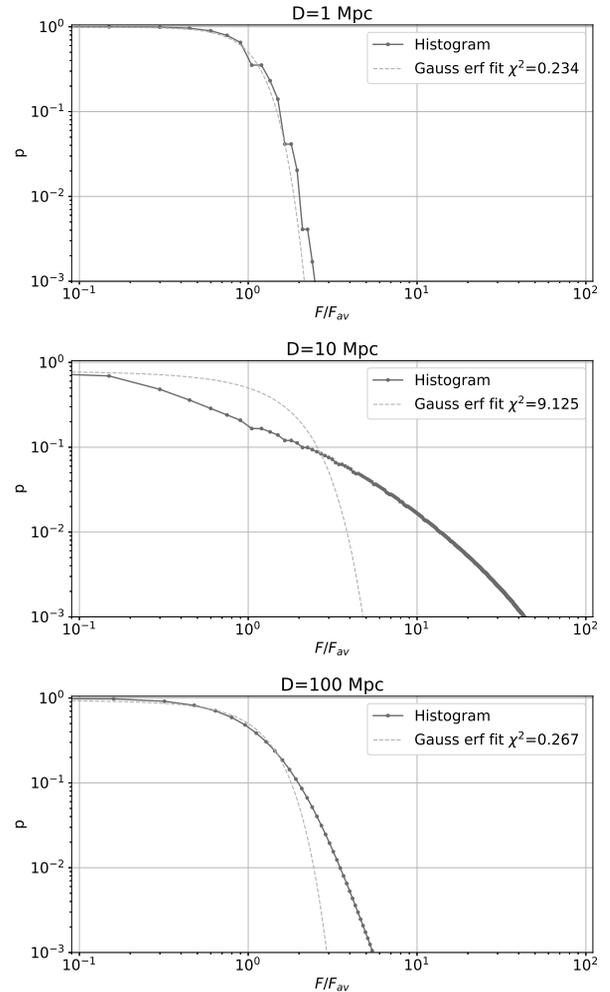


**Fig. 1.** UHECR distribution on a sphere with a radius of 10 Mpc. From top to bottom, the magnetic field was turned off after 1,3,10 correlation lengths, respectively.

by fluctuations of the magnetic field rotor along the trajectories of neighbouring particles. Namely, the cross-sectional area  $A(D)$  of the particle beam trajectories turns out to be linearly dependent on the magnetic field rotor [6]. In the case of a diverging beam, results of Ref. [6] should be modified due to different beam geometry, which determines different initial conditions. We have used corresponding initial conditions and have derived the equation for the diverging beam:

$$A(D) = A_0 \left( 1 - \frac{Ze}{E} \int_0^D s \left( 1 - \frac{s}{D} \right) (\text{rot} \vec{B} \cdot d\vec{s}) \right). \quad (1)$$

It should be noted that the equations are valid only for small amplification  $(A(D) - A_0)/A_0 \ll 1$  and small deflections of particles. Rewriting Eq. (1) in terms of



**Fig. 2.** The cumulative probability of detecting an above-average flux on a sphere with a radius of 1, 10 and 100 Mpc from the source. At a distance close to the Larmor radius, the distribution is strongly non-Gaussian.

the number of particles  $N$ , we arrive to a relation that can be verified directly in numerical simulations:

$$\frac{\Delta N}{N} = \frac{1}{R_L} \left[ \frac{\int_0^D s(D-s)(\text{rot} \vec{B} \cdot d\vec{s})}{DB} \right], \quad (2)$$

where  $R_L$  is a Larmor radius.

We use publicly available codes `CRbeam` [9] and `CRPropa` [10, 11] for cosmic ray propagation. All interactions and cosmological expansion of the Universe are turned off. The particles were emitted isotropically and propagated until they reached a sphere of a given radius  $D$ . The resulting output is processed with the package `healpy` [12, 13].

In Fig. 1, lower panel, we show a sky map with UHECR density at a fixed radius of the sphere around the source. This figure shows an example of a UHECR with  $E = 10$  EeV propagating in a turbulent magnetic field with strength  $B = 1$  nG and coherence scale  $\lambda_C = 1$  Mpc. With such a field and energy of cosmic rays, we expect that the maximum anisotropy in the UHECR distribution will be reached at 10 correlation lengths, i.e. at a distance of  $D = 10$  Mpc. The bar under the figure shows the color correspondence to the density of cosmic rays in the structures. Three types of structures can be identified: knots with the highest density, filaments and voids with the lowest density. Note that the typical size of a magnetic field domain with  $\lambda_C = 1$  Mpc has an angular scale of 6-10 degrees on this map and corresponds to small features. However, the most prominent and highly visible are the medium-scale structures, with a typical scale of about 60 degrees. To understand the angular scale of these structures, we have shown in Fig. 1 the UHECR density at  $D = 10$  Mpc, but when the magnetic field is set to zero outside the 1 and 3 Mpc spheres, see top and middle panels respectively. It can be seen that most of the global structure observed at a distance of 10 Mpc is formed during the passage of the first 3 correlation lengths from the source, its physical size corresponded to the correlation length at that time. Later on the structure mainly sharpens.

By randomly changing the location of the observer, we calculate the cumulative probability of detecting a flux above a given value which is shown in the Fig. 2. The x-axis is normalized to the mean density on the sphere. We plot the cumulative probability at a distance of 1, 10, and 100 Mpc from the source, from the top panel to the bottom, respectively. Both at small and large distances, the probability distribution is similar to Gaussian. However, in the middle panel it is very far from Gaussian. The probability of getting a flux below average is 80%. At this distance from the source, the initial flux is likely to decrease, e.g. by a factor of 10 with a probability of about 20%. The probability of an order of magnitude gain is only 2% .

Finally, we have verified that the appearance of caustic-like structures does not depend on specific parameters of the magnetic field spectrum. In particular, our results are robust to changes in the ratio of maximum and minimum turbulence scales.

**Conclusions.** In this work, we have studied the propagation of UHECRs in a turbulent intergalactic magnetic field in the small-angle scattering regime. We

found that even if UHECRs are emitted isotropically from their source, they are distributed anisotropically at a distance of the order of the Larmor radius, and again isotropically at a distance 10 times greater. The enhanced regions merge into a filamentary, caustic-like structure on the sphere. The angular arrangement of these regions is dictated by the structure of the magnetic field at several coherence lengths from the source.

The relative size of the enhanced regions depends on the coherence length of the magnetic field. This anisotropic distribution can affect the UHECR spectrum at distances from the source comparable to the Larmor radius. In addition, this can also lead to the formation of hot spots in the observer's distribution of cosmic rays over the sky, and can also affect the ratio between the number of observed hot spots and the density of UHECR sources.

**Funding.** Work of K.D., A.K., G.R. and I.T. was supported by the Russian Science Foundation grant 20-42-09010. The work of D.S. has been supported by the French National Research Agency (ANR) grant ANR-19-CE31-0020.

*The full text of this paper is published in the English version of JETP.*

## REFERENCES

1. F. Casse, M. Lemoine, and G. Pelletier, *Phys. Rev. D* **65**, 023002 (2016).
2. G. Giacinti, M. Kachelriess, and D. V. Semikoz, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 261101 (2012).
3. G. Giacinti, M. Kachelriess, and D. V. Semikoz, *JCAP* **07**, 051 (2018).
4. D. Harari, S. Mollerach, and E. Roulet, *Phys. Rev. D* **93**, 063002 (2016).
5. D. Harari, S. Mollerach, and E. Roulet, *JHEP* **10**, 047 (2000).
6. D. Harari, S. Mollerach, and E. Roulet, and F. Sanchez, *JHEP* **03**, 045 (2002).
7. K. Dolag, M. Kachelriess, and D. V. Semikoz, *JCAP* **01**, 033 (2009).
8. D. Harari, S. Mollerach, and E. Roulet, *JHEP* **08**, 022 (1999).

9. V. Berezhinsky and O. Kalashev, *Phys. Rev. D* **94**, 023007 (2016).
10. R. Alves Batista, A. Dundovic, M. Erdmann, Karl-Heinz Kampert, D. Kuempel, G. Müller, G. Sigl, A. van Vliet, D. Walz, and T. Winchen, *JCAP* **05**, 038 (2016).
11. R. Alves Batista et al., *JCAP* **09**, 035 (2022).
12. A. Zonca, L. Singer, D. Lenz, M. Reinecke, C. Rosset, E. Hivon, and K. Gorski, *Journal of Open Source Software* **4**, 1298 (2019).
13. K. M. Górski, E. Hivon, A. J. Banday, B. D. Wandelt, F. K. Hansen, M. Reinecke, and M. Bartelmann, *Astrophys. J.* **622**, 759 (2005).
14. J. Giacalone and J. R. Jokipii, *Astrophys. J.* **520**, 204 (1999).

# ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСЕЙ НА АДсорбЦИЮ КИСЛОРОДА НА ПОВЕРХНОСТИ $Ti_5Si_3(0001)$

А. В. Бакуллин <sup>a,\*</sup>, Л. С. Чумакова <sup>a</sup>, С. Е. Кулькова <sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> *Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук  
634055, Томск, Россия*

<sup>b</sup> *Национальный исследовательский Томский государственный университет  
634050, Томск, Россия*

Поступила в редакцию 19 января 2023 г.,  
после переработки 31 января 2023 г.  
Принята к публикации 31 января 2023 г.

Методом проекционных присоединенных волн в рамках теории функционала электронной плотности изучено влияние примесей простых и переходных металлов, а также примесей внедрения (B, C, N) на адсорбцию кислорода на поверхности силицида титана  $Ti_5Si_3$ . Показано, что наибольшее изменение энергии адсорбции наблюдается для примесей второй половины  $3d-5d$ -периодов, замещающих титан. Простые металлы и примеси внедрения также ведут к понижению взаимодействия кислорода с поверхностью. Проведенный анализ локальных плотностей электронных состояний, распределения разности зарядовой плотности, зарядового переноса и заселенности связей кислорода с ближайшими атомами позволил вскрыть особенности влияния примесей на химическую связь кислорода с поверхностью силицида титана. Обсуждаются факторы, ответственные за увеличение/уменьшение энергии адсорбции кислорода на легированной поверхности. Выявлена корреляция между изменением энергией адсорбцией и электроотрицательностью примесей.

DOI: 10.31857/S0044451023060056  
EDN: DEGXME

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Известно, что силициды переходных металлов интенсивно изучаются с начала 50-х годов прошлого столетия, но интерес к ним остается неизменным из-за их важных технологических приложений в микроэлектронике [1–3]. Металлические силициды широко используются в качестве локальных контактов в устройствах на основе металл-оксид-полупроводниковых элементов из-за их низкого удельного сопротивления, высокой термической стабильности, а также совместимости со стандартной кремниевой технологией [3]. Кроме приложений в микро- и оптоэлектронике [4] металлические силициды рассматриваются как перспективные материалы для аэрокосмической техники из-за низкой плотности, высокой температуры плавления ( $> 2000^\circ\text{C}$ ), высокого сопротивления ползуче-

сти и стойкости к окислению при повышенных температурах. Стремление повысить рабочую температуру известных конструкционных материалов и, в первую очередь, интерметаллидов, которые имеют также высокие температуры плавления и обладают хорошими механическими свойствами, привело к их обширным исследованиям и позволило сформулировать основные требования к материалам для высокотемпературных приложений [5–8]. Среди них низкая плотность, высокая прочность и хорошая стойкость к окислению при высоких температурах, а также возможности для легирования или композирования. В настоящее время, несмотря на интенсивные исследования, не существует строгого теоретического объяснения влияния легирующих добавок и их комбинаций на функциональные свойства даже наиболее изученных интерметаллидов, среди которых алюминиды титана. При легировании сплава  $\gamma-TiAl$  ниобием и кремнием на внутреннем интерфейсе наблюдается формирование пленки силицида титана состава  $Ti_5Si_3$ , с которой связывается положительный эффект на стойкость к окислению данного сплава [9]. Такой же эффект наблюдается и в слу-

\* E-mail: bakulin@ispms.tsc.ru

чае холодного напыления Al-40Si (мас.%) на поверхность сплава [10], при этом отмечается формирование диффузионного покрытия  $Ti(Al, Si)_3$ . Как считают авторы [10], образовавшийся стабильный диффузионный барьер из фазы  $Ti_5Si_3$  может тормозить интердиффузию между покрытием и подложкой и способствовать формированию пленки  $Al_2O_3$ . Именно с формированием плотного и защитного слоя  $Al_2O_3$  связывается высокая стойкость к окислению алюминия и сплавов Ti-Al с низким содержанием титана [11].

Необходимо отметить, что сам силицид титана со стехиометрией  $Ti_5Si_3$  считается также перспективным кандидатом для высокотемпературных приложений. Он имеет высокую температуру плавления ( $2130^\circ C$ ) и удельную прочность, а также обладает хорошим сопротивлением ползучести, а плотность данного материала составляет  $4.32 \text{ г/см}^3$  [12]. Однако серьезными недостатками этого соединения являются, прежде всего, его хрупкость, недостаточная стойкость к высокотемпературному окислению, а также сложность его синтеза при температурах выше  $1600^\circ C$ . Физико-химические и механические свойства силицида титана интенсивно изучались в литературе [13–15], при этом теоретическими методами в основном исследовалась бинарная система. В частности, в работе [13] зонная структура и плотности электронных состояний (ПЭС)  $Ti_5Si_3$  были рассчитаны полуэмпирическим расширенным методом Хюккеля (Hückel), что позволило авторам выявить механизм химической связи в объемном соединении и объяснить его хорошую электропроводность. В дальнейшем расчеты электронной структуры  $Ti_5Si_3$  проводились полно-потенциальным линейным методом MT-орбиталей (FLMTO) в работе [14]. На основе распределения зарядовой плотности был сделан вывод, что природа Ti-Si-взаимодействия является более сложной, чем описанная ранее на основе простой двухатомной ковалентной связи. Рассчитанные значения модуля упругости и энтальпии образования были лишь незначительно ниже, чем экспериментальные. Детальные расчеты электронной структуры и упругих свойств пяти фаз силицида титана были проведены методом проекционных присоединенных волн (PAW) в работе [15]. Были рассчитаны константы упругости  $C_{ij}$  и разные упругие модули, а также характеристики на их основе. Энтальпия образования различных фаз силицида титана рассчитывалась также в нескольких работах [16–19] с использованием методов *ab initio* в рамках теории функционала плотности. В то же время влияние примесей на фундаментальные свой-

ства  $Ti_5Si_3$  изучалось в меньшей степени (см. работы [20–25] и ссылки в них). Влияние примесей замещения на упругие свойства изучалось методом псевдопотенциала в работах [20, 21]. Следует отметить, что в отличие от силицидов титана других составов, возможности легирования  $Ti_5Si_3$ , имеющего гексагональную структуру, выражены в большей степени. Известно, что решетка данного соединения может вместить до 11 ат.% таких атомов, как B, C, N. В работах [22, 23] было экспериментально показано, что внедрение атомов C, N, O приводит к уменьшению параметров решетки соединения  $Ti_5Si_3$ , а также к понижению анизотропии его свойств, например, коэффициента теплового расширения. Кроме того, эксперимент показал, что добавление B [22] и Si [23], напротив, ведет к увеличению параметров решетки. Согласно расчетам [22], проведенным линейным методом MT-орбиталей в приближении атомной сферы (LMTO-ASA), только внедрение кислорода ведет к незначительному уменьшению параметров решетки, хотя все рассмотренные примеси усиливают межатомные связи в  $Ti_5Si_3$ . Экспериментальное изучение  $Ti_5Si_3$  с добавками бора, углерода, азота и кислорода проводилось также в работе [24]. Методом рентгеновской дифракции было показано, что примесные атомы располагаются в междоузлиях, при этом связь между ними и атомами титана приводит к уменьшению объема междоузлий, в результате чего наблюдаются значительные изменения длин связей. Наиболее заметно увеличивается длина связи между атомами титана *6g*-симметрии и кремнием, тогда как длина связи между атомами титана, напротив, уменьшается. Влияние азота на скорость окисления  $Ti_5Si_3$  детально изучалось в работе [25]. Было показано, что медленное окисление по параболическому закону, которое происходит в атмосфере кислорода, сменяется быстрым окислением по линейному закону в атмосфере азота. Растрескивание и осыпание оксидной шкалы происходит даже при кратковременной выдержке, если в окислительной среде содержится более 75%  $N_2$ , а скорость реакции повышается с увеличением концентрации азота. Авторы [25] объяснили негативное влияние азота образованием на границе раздела оксид/подложка фазы TiN, которая в дальнейшем окисляется до  $TiO_2$ , препятствуя образованию сплошного защитного слоя  $SiO_2$ .

В наших ранних работах было проведено изучение электронной и фононной структуры  $Ti_5Si_3$ , механических, термодинамических и тепловых свойств [26], а также поверхностной структуры [27]. Было показано, что наиболее стабильной является поверх-

ность  $Ti_5Si_3(0001)_{TiSi}$  со смешанным окончанием. Был определен механизм взаимодействия кислорода с данной поверхностью. В работе [28] рассматривалась также диффузия кислорода в объемном соединении. Следует отметить, что внедрение кислорода в междоузлие уменьшает объем ячейки примерно на  $2.21 \text{ \AA}^3$ . В пересчете на относительные единицы и в терминах работ [22] получаем, что добавление 0.5 кислорода понижает объем ячейки  $Ti_5Si_3$  примерно на 0.9%, что удовлетворительно согласуется с результатом около 1% при концентрации кислорода 0.4 [22]. Влияние примесей на адсорбционные свойства  $Ti_5Si_3$  ранее не исследовалось. Таким образом, целью настоящей работы является изучение влияния примесей переходных и простых металлов, а также В, С и N на адсорбцию кислорода на стабильной поверхности  $Ti_5Si_3(0001)$  со смешанным окончанием.

## 2. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ДЕТАЛИ

Расчеты атомной и электронной структуры поверхности  $Ti_5Si_3(0001)$  выполнены методом проекционных присоединенных волн (PAW) в плоско-волновом базисе [29, 30]. Для обменно-корреляционного функционала использовалось обобщенное градиентное приближение (GGA-PBE) [31]. Максимальная энергия плоских волн из базисного набора составила 550 эВ. Известно, что в  $Ti_5Si_3$  атомы титана занимают позиции Вайкоффа (Wyckoff) двух типов симметрии:  $4d$  (1/3, 2/3, 0) и  $6g$  (0.250, 0, 1/4), тогда как атомы кремния находятся в позициях  $6g$  (0.608, 0, 1/4). Теоретические параметры решетки  $a = 7.466 \text{ \AA}$  и  $c = 5.108 \text{ \AA}$  отличаются от экспериментальных [32] менее, чем на 0.8%.

Для расчета атомной и электронной структуры поверхности  $Ti_5Si_3(0001)$  использовался подход многослойных пленок, разделенных вакуумным промежутком не менее  $15 \text{ \AA}$ . Поверхность  $Ti_5Si_3(0001)$  со смешанным TiSi-окончанием моделировалась 10-слойной несимметричной пленкой, при этом атомные позиции трех слоев с одной стороны пленки были фиксированы при объемных значениях. В поверхностном слое находилось равное число атомов титана и кремния, тогда как подповерхностный слой состоял только из атомов титана (рис. 1а). Релаксация атомных позиций остальных слоев проводилась методом сопряженных градиентов до тех пор, пока силы на атомах не уменьшались при-

мерно до  $0.01 \text{ эВ/\AA}$ . В расчетах использовалась Г-центрированная сетка из  $k$ -точек  $7 \times 7 \times 1$ .

Энергия адсорбции кислорода на легированной поверхности рассчитывалась по следующей формуле:

$$E_{ads} = - \left[ E_{O/Ti_5Si_3X} - E_{Ti_5Si_3X} - \frac{1}{2} E_{O_2} \right], \quad (1)$$

где  $E_{O/Ti_5Si_3X}$  и  $E_{Ti_5Si_3X}$  – полные энергии легированной поверхности с кислородом и без него, а  $E_{O_2}$  – полная энергия молекулы кислорода, X – легирующий элемент в поверхностном слое. Коэффициент 1/2 соответствует адсорбции одного атома кислорода на одной поверхности пленки.

## 3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Ранее в работе [27] было установлено, что энергетически предпочтительной для адсорбции кислорода на чистой поверхности  $Ti_5Si_3(0001)_{TiSi}$  является F1-позиция, энергия адсорбции в которой достигает 6.13 эВ. В данной позиции адатом кислорода трехкратно координирован атомами титана и располагается над естественным каналом для диффузии в кристаллической структуре силицида (рис. 1б). Во второй по предпочтительности F2-позиции, в которой вблизи кислорода находится также атом кремния, энергия адсорбции на 0.83 эВ меньше, чем в F1. Расчеты вероятности нахождения кислорода в данных позициях показали, что не менее 98% всех адатомов кислорода будут занимать именно F1-позицию. В целом в [27] был сделан вывод, что механизм химической связи кислорода с  $Ti_5Si_3(0001)_{TiSi}$  носит преимущественно ионный характер, а уменьшение переноса заряда к адатому коррелирует с уменьшением энергии адсорбции в изученных позициях [27]. Например, в F1-позиции кислород получает 0.76 эл., тогда как в F2 – лишь 0.48 эл. Необходимо отметить, что примеси, согласно расчетам энергий образования дефекта, могут замещать атомы титана как с  $4d$ -, так и с  $6g$ -симметрией, однако замещение кремния требует значительно большей энергии. Поскольку атомы  $Ti_{4d}$  находятся на расстоянии примерно  $5 \text{ \AA}$  от адатома кислорода, то эффект от их замещения, во-первых, очень слабо выражен, а, во-вторых, обусловлен не изменением химической связи кислорода с поверхностью, а изменением поверхностной энергии. Аналогичный эффект был найден при адсорбции кислорода в  $H_{Al}$ -позиции на поверхности  $Ti_3Al(0001)$  в нашей работе [33]. Поэтому в настоящей работе примесным атомом замещался один из трех ближайших к кисло-

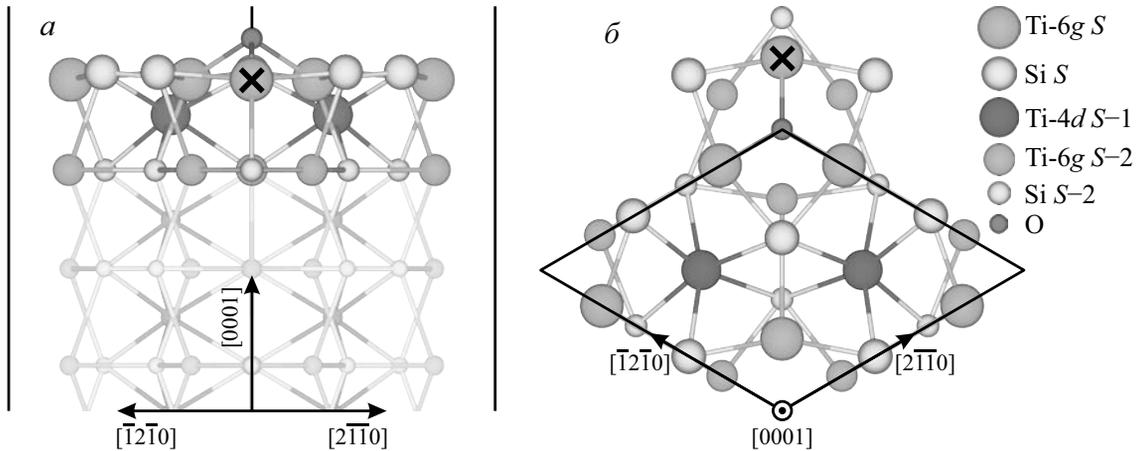


Рис. 1. Атомная структура поверхности  $Ti_5Si_3(0001)$  с кислородом, адсорбированным в наиболее предпочтительной позиции: вид сбоку (а); вид сверху (б). Позиция примесного атома на Ti-подрешетке  $6g$ -симметрии показана крестиком

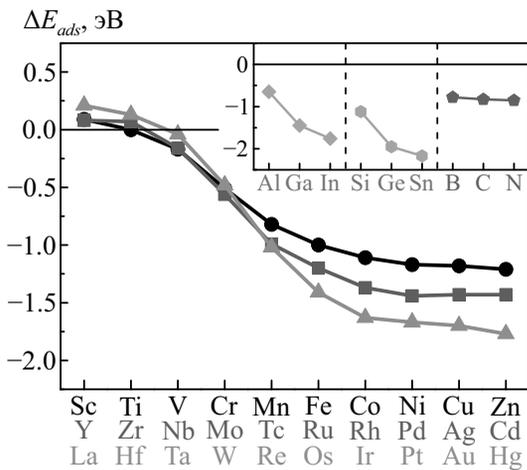


Рис. 2. Изменение энергии адсорбции кислорода ( $\Delta E_{ads}$ ) на поверхности  $Ti_5Si_3(0001)_{TiSi}$  в зависимости от примеси на  $Ti_{6g}$ -подрешетке

роду поверхностных атомов титана с  $6g$ -симметрией (рис. 1).

Изменение энергии адсорбции вследствие легирования показано на рис. 2. Видно, что практически все примеси понижают  $E_{ads}$ ; исключение составляют только элементы начала  $d$ -периодов. В целом тенденции в изменении энергии адсорбции для металлов трех  $d$ -периодов подобны, а наиболее выраженный эффект оказывают примеси второй половины периодов. Для объяснения данного эффекта обсудим особенности атомной и электронной структуры легированной поверхности с кислородом и без него.

В случае примесей Y и La повышение энергии адсорбции обусловлено увеличением ионной состав-

ляющей в механизме химической связи кислорода с поверхностью. Из таблицы следует, что перенос заряда от поверхности к атому кислорода увеличивается примерно на 0.1 эл. (в таблице в качестве примера приведены данные только для La). Поскольку La имеет на один валентный электрон меньше, чем титан, то его валентная зона незначительно сдвинута в сторону положительных энергий, что приводит к сдвигу состояний, индуцированных O-La-взаимодействием, в этом же направлении (рис. 3а). Интересно отметить, что заселенность связи O-La незначительно изменяется по сравнению с O-Ti на чистой поверхности. Последнее может быть объяснено большей вовлеченностью  $s$ -состояний La во взаимодействие с кислородом. Карта распределения разности плотности заряда ( $\Delta\rho$ ) демонстрирует большую область ухода заряда от La по сравнению с Ti (рис. 4а,б). В то же время с противоположной стороны примесного атома располагается область аккумуляции заряда, что означает поляризацию лантана вследствие взаимодействия с кислородом.

В случае примесей изоэлектронных титану (IVB группы) перенос заряда к кислороду остается практически таким же, как и на нелегированной поверхности (см. Zr в таблице). При этом примесный атом Zr отдает несколько больший заряд, чем ближайшие атомы титана, уход заряда от которых слегка уменьшается по сравнению с чистой поверхностью. На рис. 3б можно видеть, что локальные плотности электронных состояний Zr слабо отличаются от ПЭС Ti: характерные пики располагаются при одинаковых энергиях, а различия заключаются в их высоте. Аналогичная ситуация характерна и для Hf. Распределение разности плотности заряда вблизи Zr

**Таблица 1.** Зарядовые состояния адатома кислорода и ближайших к нему поверхностных атомов титана и примеси Me, а соответствующие длины связей O–Me и электроотрицательности примесей

Примесь	–	La	Zr	Nb	Mo	Re	Cu
$q(O)$ , эл.	–0.76	–0.83	–0.75	–0.67	–0.60	–0.51	–0.64
$q(Me)$ , эл.	+0.98	+1.40	+1.11	+0.70	+0.33	–0.09	+0.21
$q(Ti)$ , эл.		+0.94	+0.96	+0.96	+0.94	+0.91	+0.96
$\chi(X)$ , эВ <sup>–1/2</sup> [34]	1.54	1.10	1.33	1.60	2.16	1.90	1.90
$d(O–Me)$ , Å	1.96	2.21	2.11	2.07	2.05	2.05	2.21
$d(O–Ti)$ , Å		1.91	1.96	1.95	1.94	1.96	1.90
$\theta(O–Me)$ , эл.	0.48	0.50	0.49	0.54	0.56	0.62	0.27
$\theta(O–Ti)$ , эл.		0.46	0.47	0.46	0.47	0.44	0.52
$R_{cov}(Me)$ , Å [35]	1.60	2.07	1.75	1.64	1.54	1.51	1.32

подобно распределению  $\Delta\rho$  на нелегированной поверхности с той лишь разницей, что область аккумуляции рядом с Zr отсутствует (рис. 4б).

Заметим, что электроотрицательность и ковалентный радиус Nb незначительно превышают эти характеристики для Ti, поэтому перенос заряда к кислороду уменьшается лишь на 0.09 эл. по сравнению с нелегированной поверхностью (таблица), что может являться индикатором уменьшения ионного вклада в химическую связь кислорода с поверхностью. Большая на 0.06 эл. заселенность связи O–Nb, по сравнению с O–Ti, обусловлена увеличением числа валентных электронов Nb и указывает на повышение ковалентного вклада. Смещение состояний, обусловленных гибридизацией O–Nb, на соответствующих локальных ПЭС (рис. 3б) также подтверждает некоторое усиление ковалентности связи. Описанные выше тенденции усиливаются при легировании молибденом: перенос заряда уменьшается на 0.16 эл., а заселенность перекрывания орбиталей O–Mo оказывается больше, чем O–Ti на 0.08 эл. (таблица). В этом случае локальные ПЭС гибридизованных состояний O–Mo сильнее сдвигаются в сторону отрицательных энергий (рис. 3з). Таким образом, легирование Nb и Mo приводит к уменьшению ионности связи кислорода с подложкой, но увеличивает ее ковалентность. В результате наблюдается уменьшение энергии адсорбции соответственно на 0.16 и 0.56 эВ. Электроотрицательность молибдена существенно больше, чем титана, поэтому область аккумуляции заряда вокруг примесного атома становится больше по сравнению с нелегированной поверхностью (рис. 4з).

Согласно проведенным расчетам, в случае простых металлов изоэлектронных алюминию их энер-

гии образования на разных подрешетках не демонстрируют определенной закономерности: Al предпочитает замещать Ti<sub>4d</sub>, In – Ti<sub>6g</sub>, а Ga – Si. В то же время изоэлектронные кремнию элементы находятся на его подрешетке – минимальная разница в энергиях образования дефекта на Si- и двух Ti-подрешетках составляет около 0.7 эВ. Тем не менее, если эти примеси замещают поверхностный атом Ti<sub>6g</sub>, то они уменьшают энергию адсорбции кислорода в ближайшей F1-позиции на 0.65–2.17 эВ (см. вставку на рис. 2). Данный эффект обусловлен как большим значением электроотрицательности этих элементов по сравнению с титаном, так и уменьшением ковалентности связи O–Me из-за изменения характера гибридизации (с O p – Me d на O p – Me s, p). Более выраженное влияние элементов IVA группы связано именно с их более высокой электроотрицательностью по сравнению с элементами IIIA группы.

На рис. 2 можно видеть, что примеси внедрения, такие как В, С и N, понижают энергию адсорбции практически в одинаковой степени (на 0.78–0.85 эВ). Отметим, что примесный атом размещался в естественном канале для их диффузии непосредственно под атомом кислорода на уровне подповерхностного слоя. В этом случае равновесное расстояние между атомами примеси и кислорода составляло 2.5–2.6 Å. Другими словами, химическая связь между ними не образуется, а взаимодействие сводится к кулоновскому отталкиванию вследствие одноименности их заряда, поскольку оба неметалла имеют высокие значения электроотрицательности и выступают в качестве акцепторов. На рис. 5 можно видеть, что между атомами примеси внедрения и кислородом в результате адсорбции последнего образуется область ухода заряда. Такая картина перераспреде-

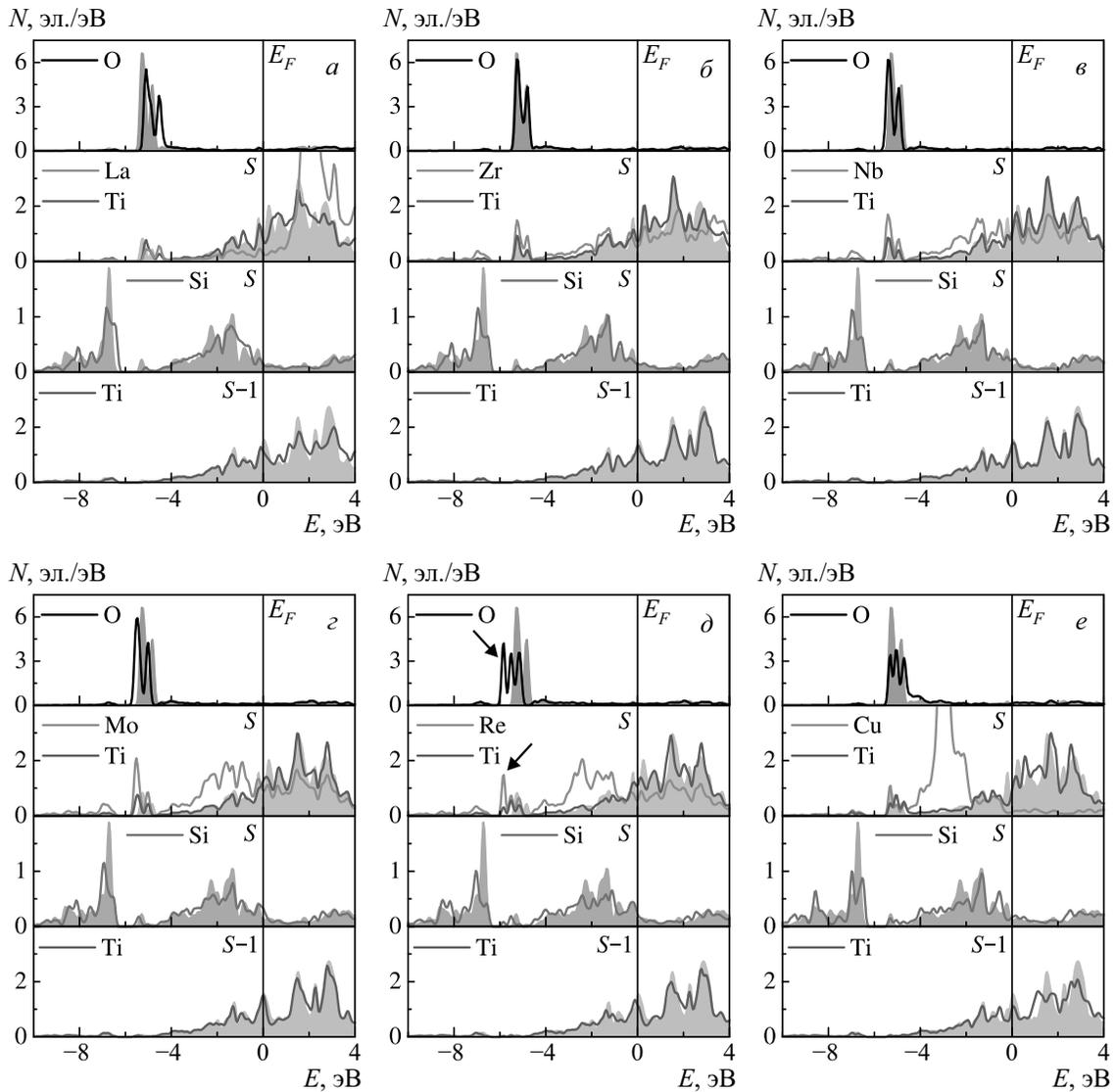


Рис. 3. Локальные ПЭС поверхностных и подповерхностных атомов при адсорбции кислорода на поверхности  $Ti_5Si_3(0001)$  с примесями La (а), Zr (б), Nb (в), Mo (г), Re (д) и Cu (е). Символы S и S-1 обозначают поверхностные и подповерхностные атомные слои. Заливкой показаны ПЭС атомов на нелегированной поверхности

ния зарядовой плотности свидетельствует об электростатическом отталкивании между атомами примеси и кислорода. В пользу нехимического взаимодействия говорит также практически полное отсутствие гибридных состояний O-X на парциальных ПЭС (рис. 6). Отметим, что с заполнением *p*-оболочки примеси (X) ее *s*-состояния сильно смещаются в сторону отрицательных энергий. В случае В пик *s*-состояний расщепляется на два, что обусловлено взаимодействием с ближайшими атомами. Главные пики *s*-состояний С и N расположены в области -10.6 и -15.0 эВ и не показаны на рис. 6б,в. Они имеют атомоподобную структуру (резкий уз-

кий пик) и практически не вовлекаются во взаимодействие с ближайшими атомами титана.

В заключение обсудим некоторые корреляции между изменением энергии адсорбции кислорода и рядом характеристик примесных атомов. Поскольку доминирующим механизмом химической связи является ионный, то логично предположить, что уменьшение энергии связи должно коррелировать с увеличением электроотрицательности примесного атома. На рис. 7а видно, что распределение металлов по  $\Delta E_{abs}$  и  $\chi$  носит неслучайный характер, а коэффициент корреляции *r* достигает -0.84. Наибольшее отклонение от прямой, построенной ме-

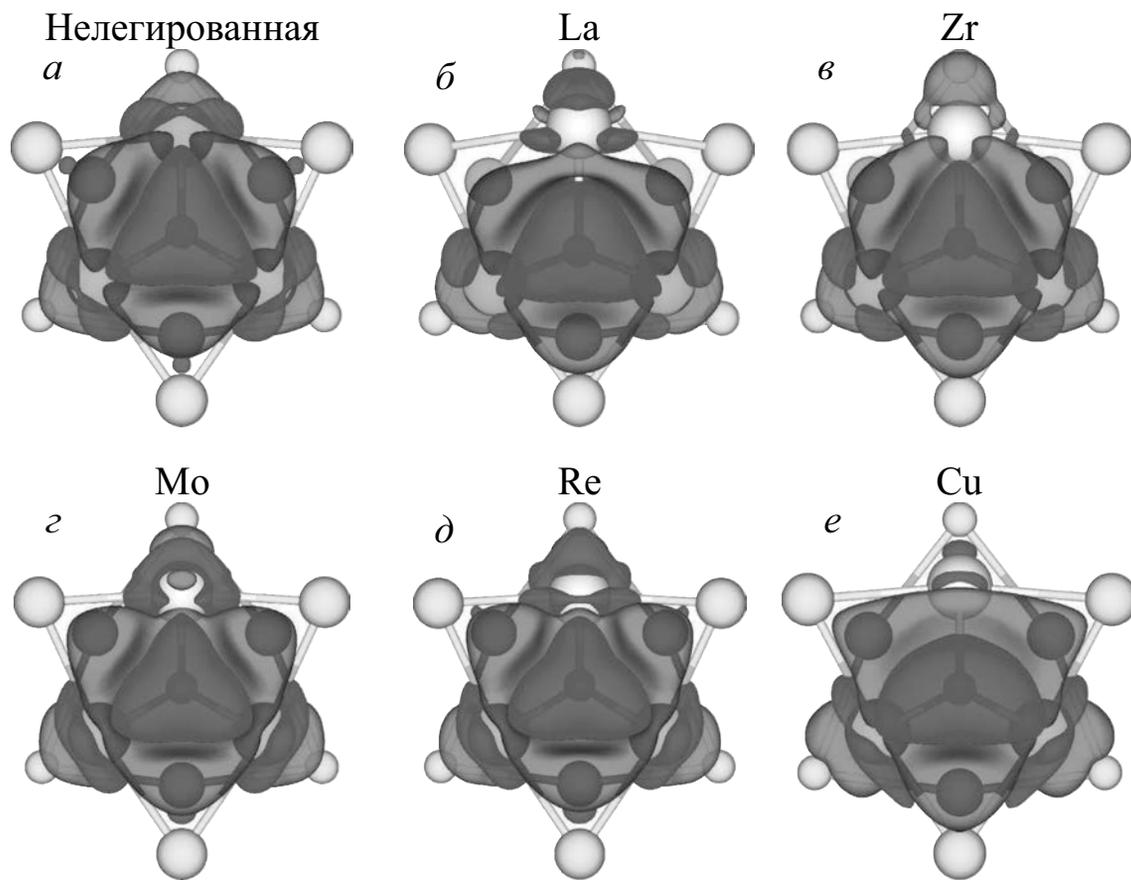


Рис. 4. Распределение разности плотности заряда ( $\Delta\rho = \rho(O) + \rho(Ti_5Si_3) - \rho(O/Ti_5Si_3)$ ) для чистой поверхности (а) и с примесями (б–е). Области аккумуляции и ухода заряда показаны синим и красным цветом. Поверхности постоянной плотности соответствуют заряду  $0.015 \text{ эл./\AA}^3$ . Обозначения атомов как на рис. 1

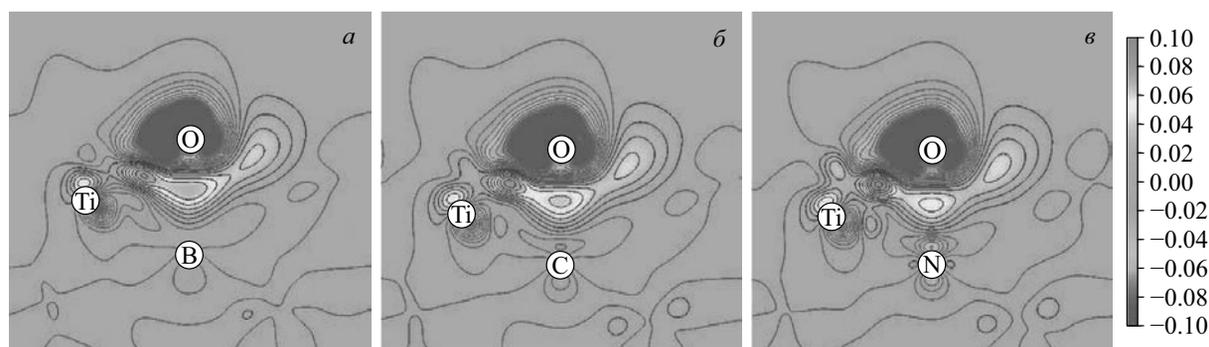


Рис. 5. Распределение разности плотности заряда в случае примесей внедрения В (а), С (б) и N (в). Области аккумуляции и ухода заряда показаны синим и красным цветом. Изолинии проведены от  $-0.1$  до  $0.1 \text{ эл./\AA}^3$  с шагом  $0.01 \text{ эл./\AA}^3$

тодом наименьших квадратов, демонстрируют элементы с полностью заполненной  $d$ -оболочкой, такие как Zn, Cd, Hg (рис. 7а), а также некоторые другие металлы, например, Mo и Ti. В целом с заполнением  $d$ -оболочки примеси электроотрицательность возрастает, но для ряда металлов эта тен-

денция нарушается. Именно такие элементы демонстрируют наибольшее отклонение от линии тренда на рис. 7а. В частности, электроотрицательность Zn, Cd и Hg скачкообразно понижается по сравнению с элементами, стоящими левее в периодической таблице, тогда как изменения энергии адсорбции остают-

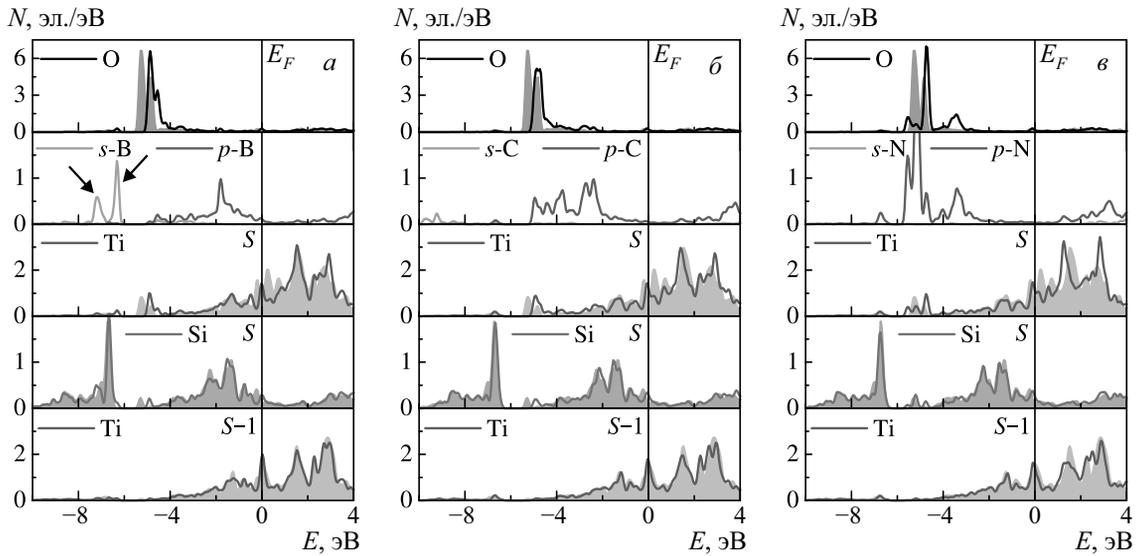


Рис. 6. Локальные ПЭС поверхностных и подповерхностных атомов при адсорбции кислорода на поверхности  $Ti_5Si_3(0001)$  с примесями В (а), С (б) и N (в). Символы S и S-1 обозначают поверхностные и подповерхностные атомные слои. Заливкой показаны ПЭС атомов на нелегированной поверхности

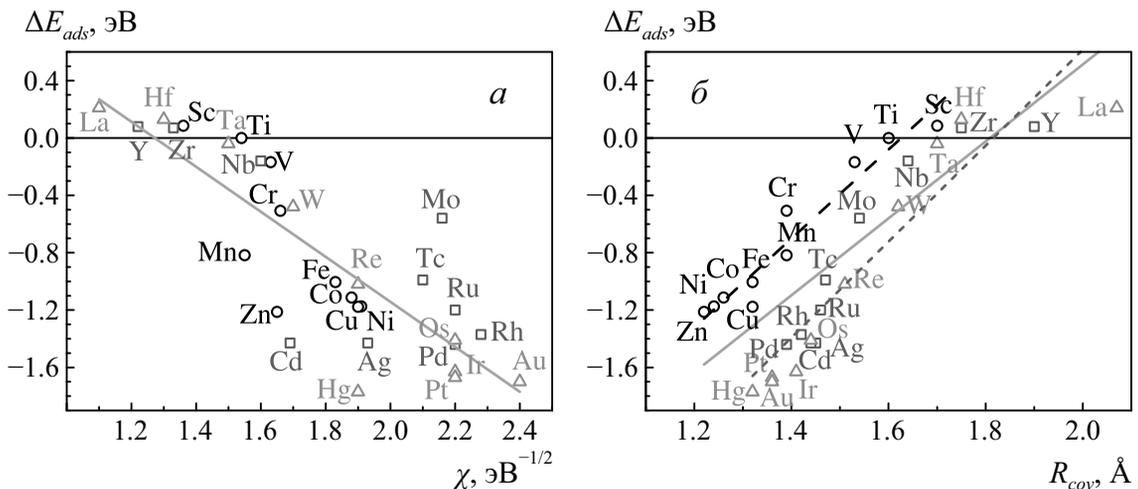


Рис. 7. Корреляция между изменением энергии адсорбции кислорода на поверхности  $Ti_5Si_3(0001)$  и электроотрицательностью (а) и ковалентным радиусом (б) примесного атома

ся практически такими же (рис. 2). Как результат, точки Zn, Cd и Hg на рис. 7а лежат значительно левее линии тренда. Напротив, электроотрицательность Mo и Ti резко увеличивается по сравнению с элементами, стоящими левее, а  $\Delta E_{ads}$  уменьшается не так радикально, поэтому соответствующие точки на рис. 7а лежат правее линии тренда. Таким образом, увеличение электроотрицательности по сравнению с титаном ( $1.54 \text{ eV}^{-1/2}$ ) приводит к уменьшению энергии адсорбции вследствие уменьшения ионного вклада в механизм химической связи кислорода с поверхностью. Чем больше значение  $\chi$ , тем сильнее

уменьшается  $E_{abs}$ . При  $\chi < 1.54 \text{ eV}^{-1/2}$  значительно возрастания энергии адсорбции не наблюдается, поскольку увеличение ионности связи частично компенсируется увеличением расстояния O-X (увеличением ковалентного радиуса примеси) и/или уменьшением числа валентных электронов примеси, которые вовлекаются во взаимодействие.

Другой характеристикой, с которой может быть связано изменение энергии адсорбции, является размер примесей, а именно, их ковалентный радиус. Выбор этого радиуса обусловлен его физическим смыслом, поскольку он равен половине

длины ковалентной связи в простом веществе. На рис. 7б проведено сопоставление полученных значений  $\Delta E_{ads}$  и  $R_{cov}$  примесных элементов 3d-5d-периодов. Видно, что, как и в предыдущем случае, распределение носит неслучайный характер, а увеличение ковалентного радиуса металла ведет к увеличению энергии абсорбции. Коэффициент корреляции в этом случае равен 0.81. Интересно, что данное наблюдение контринтуитивно, поскольку естественно ожидать ослабление взаимодействия O–Me с увеличением длины связи, а значит, и увеличением атомного размера металла. Однако объяснение данного явления заключается в том, что длина связи O–Me не связана напрямую с размером Me атома. Известно, что в целом с заполнением *d*-оболочки примеси ее атомный размер уменьшается, а длина связи O–Me, например, в оксидах этих металлов, напротив, увеличивается вследствие понижения их химической реактивности. На рис. 7б большее число элементов демонстрирует отклонение от линии тренда (сплошная прямая), чем на рис. 7а. Большой разброс связан с тем, что все 3d-металлы располагаются выше этой линии, а 4d- и 5d-металлы второй половины периодов – ниже. Если провести прямые методом наименьших квадратов для этих групп примесей по отдельности (пунктирные линии на рис. 7б), то коэффициенты корреляции достигают значений 0.97 (3d-металлы) и 0.93 (4d и 5d) соответственно. Дополнительно отметим, что 3d-металлы в основном являются магнитными, однако на поверхности немагнитного силицида титана их магнитный момент существенно понижается. Последнее ведет к повышению энергии адсорбции и отклонению от общей линии тренда. Кроме того, на рис. 7б можно видеть также, что металлы с  $R_{cov} > 1.7 \text{ \AA}$ , т. е. элементы начала *d*-периодов, слабо влияют на энергию адсорбции. Данная тенденция отмечалась ранее на рис. 2.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Влияние примесей на адсорбцию кислорода на стабильной поверхности силицида титана  $\text{Ti}_5\text{Si}_3(0001)$  со смешанным TiSi-окончанием изучено с использованием метода проекционных присоединенных волн. Проведен анализ особенностей химических связей между поверхностными атомами и кислородом в предпочтительной позиции адсорбции для ряда представительных примесей. Рассчитаны плотности электронных состояний атомов поверхностных слоев, карты распределения разности

зарядовой плотности, заселенности связей между кислородом и ближайшими к нему поверхностными атомами, а также оценен перенос заряда к адсорбату. Показано, что наибольшее изменение энергии адсорбции наблюдается для примесей второй половины 3d-5d-периодов, что обусловлено понижением ионного вклада в химическую связь между адсорбатом и поверхностью. Хотя с заполнением электронами *d*-оболочек увеличивается ковалентный вклад в химическую связь, но его увеличение не компенсирует эффект, связанный с уменьшением переноса заряда от поверхности к адсорбату. Примеси простых металлов также уменьшают энергию адсорбции кислорода, если они замещают титан. Этот эффект связан как с увеличением электроотрицательности данных элементов по сравнению с титаном, так и с понижением ковалентности связи вследствие изменения характера гибридизации орбиталей кислорода с примесными атомами. Примеси внедрения практически не образуют химических связей с адсорбатом, находясь в подповерхностном слое, а их взаимодействие с кислородом сводится к кулоновскому отталкиванию. В целом полученные результаты указывают на корреляцию между электроотрицательностью примесных атомов и изменением энергии адсорбции кислорода на легированной поверхности. Установлена предпочтительность взаимодействия кислорода с титаном, чем с примесными атомами. Хотя мы не обсуждали в данной статье изменения межатомных связей вследствие нахождения атомов внедрения в подповерхностных слоях, но вывод об их влиянии (упрочнение связей в подложке) согласуется с ранее сделанным в работах [22–24] для объемного соединения. В целом результаты данной работы позволяют понять механизмы окисления поверхности силицида титана на начальном этапе.

**Финансирование.** Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 22-23-00078). Численные расчеты проводились на суперкомпьютере СКИФ Cyberia в Томском государственном университете.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. H. Nowotny, in *Electronic Structure and Alloy Chemistry of the Transition Elements*, ed. by P. A. Beck, Intersci. Publ., New York (1963), p. 179.
2. S. P. Murarka, *Silicides for VLSI Applications*, Academic Press, New York (1983).
3. L. J. Chen, *Silicide Technology for Integrated Circuits*, IEE, London (2009).

4. J. Derrien, J. Chevrier, V. Le Thanh et al., *Appl. Surf. Sci.* **56**, 382 (1992).
5. D. L. Anton, D. M. Shah, D. N. Duhl et al., *JOM* **41**, 12 (1989).
6. R. L. Fleischer, *J. Mater. Sci.* **22**, 2281 (1987).
7. D. M. Shah, D. Berczik, D. L. Anton et al., *Mater. Sci. Eng. A* **155**, 45 (1992).
8. R. L. Fleischer, D. M. Dimiduk, and H. A. Lipsitt, *Annu. Rev. Mater. Sci.* **19**, 231 (1989).
9. R. Swadźba, L. Swadźba, B. Mendala et al., *Intermetallics* **87**, 81 (2017).
10. J. Huang, F. Zhao, X. Cui et al., *Appl. Surf. Sci.* **582**, 152444 (2022).
11. Z. Li and W. Gao, in *Intermetallics Research Progress*, ed. by Y. N. Berdovsky, Nova Sci. Publ., New York (2008), p. 1.
12. Z. Tang, J. J. Williams, A. J. Thom et al., *Intermetallics* **16**, 1118 (2008).
13. X. Long and Z. Chong, *Trans. Nonferrous Met. Soc. China* **4**, 25 (1994).
14. M. Ekman and V. Ozolins, *Phys. Rev. B* **57**, 4419 (1998).
15. M. K. Niranjana, *Mater. Res. Express* **2**, 096302 (2015).
16. C. Colinet, W. Wolf, R. Podloucky et al., *Appl. Phys. Lett.* **87**, 041910 (2005).
17. G. Shao, *Acta Mater.* **53**, 3729 (2005).
18. T. Wang, J. A. Chen, X. Ling et al., *Mod. Phys. Lett. B* **20**, 343 (2006).
19. C. Colinet and J. C. Tedenac, *Intermetallics* **18**, 1444 (2010).
20. H. Y. Wang, W. P. Si, S. L. Li et al., *J. Mater. Res.* **25**, 2317 (2010).
21. P. F. Zhang, Y. X. Li, and P. K. Bai, *IOP Conf. Series: Mater. Sci. Eng.* **284**, 012013 (2017).
22. J. J. Williams, Y. Y. Ye, M. J. Kramer et al., *Intermetallics* **8**, 937 (2000).
23. J. J. Williams, M. J. Kramer, M. Akinc et al., *J. Mater. Res.* **15**, 1773 (2000).
24. A. J. Thom, V. G. Young, and M. Akinc, *J. Alloys Compd.* **296**, 59 (2000).
25. Z. Tang, A. J. Thom, and M. Akinc, *Intermetallics* **14**, 537 (2006).
26. Л. С. Чумакова, А. В. Бакулин, С. Е. Кулькова, *ЖЭТФ* **161**, 874 (2022).
27. L. S. Chumakova, A. V. Bakulin, S. Hocker et al., *Metals* **12**, 492 (2022).
28. A. V. Bakulin, L. S. Chumakova, and S. E. Kulkova, *Intermetallics* **146**, 107587 (2022).
29. P. E. Blöchl, *Phys. Rev. B* **50**, 17953 (1994).
30. G. Kresse and D. Joubert, *Phys. Rev. B* **59**, 1758 (1999).
31. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
32. P. Villars and L. D. Calvert, *Pearson's Handbook of Crystallographic Data for Intermetallic Phases*, ASM, Metals Park, OH (1985).
33. A. V. Bakulin, S. Hocker, S. Schmauder et al., *Appl. Surf. Sci.* **487**, 898 (2019).
34. W. M. Haynes, *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 96th Edition, CRC Press/Taylor and Francis, Boca Raton, FL (2015), p. 9.
35. B. Cordero, V. Gómez, A. E. Platero-Prats et al., *Dalton Trans.* **21**, 2832 (2008).

# АКУСТИЧЕСКИЕ СОЛИТОНЫ В ГЕЛИКОИДАХ И СПИРАЛЬНЫХ НАНОЛЕНТАХ ГРАФЕНА

А. В. Савин<sup>a,b\*</sup>, О. И. Савина<sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семенова  
Российской академии наук  
119991, Москва, Россия*

<sup>b</sup> *Российский экономический университет им. Г. В. Плеханова  
117997, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 28 января 2023 г.,  
после переработки 4 февраля 2023 г.  
Принята к публикации 13 февраля 2023 г.

Проведено численное моделирование динамики локальных областей продольного сжатия в геликоидах графена и в спиральных углеродных нанолентах. Показано, что движение сверхзвукового акустического солитона с постоянной скоростью без излучения фононов может происходить только в геликоидах с поперечным радиусом  $R < 0.62$  нм с безразмерной скоростью  $1 < s < 1.4$ . В геликоидах большего радиуса и во всех спиральных углеродных нанолентах движение солитоноподобного возбуждения всегда сопровождается интенсивным излучением фононов (чем больше радиус спиральной структуры, тем сильнее излучение).

DOI: 10.31857/S0044451023060068  
EDN: DELANI

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Спиральные углеродные наноленты представляют собой особые структуры, получаемые путем разрезания и скручивания плоского листа графена. Они могут бесконечно расширяться в осевом направлении. Такие спиральные структуры (рис. 1) обладают характеристиками как однослойной наноленты, так и многослойного графена. Благодаря своим уникальным электрическим и механическим свойствам, они представляют большой интерес для нанотехнологии. Данные структуры можно разделить на два типа: на геликоиды (рис. 1 *a, b, c*) и спиральные наноленты графена (рис. 1 *d, e*). Структуры первого типа имеют вид винтовой дислокации кристаллического графита (рис. 2), структуры второго типа — вид спирально сложенной наноленты графена с полостью внутренней областью (рис. 3). Геликоиды отличаются от спиральных нанолент графена наличием жесткой сердцевины (ядра винтовой дислокации).

Недавно были синтезированы спиральные аналоги молекулы гелицена (*helicene*) [1] и кекулена (*kekulene*) [2], которые можно рассматривать как спирально скрученные киральные наноленты графена. Спиральные структуры двумерных материалов могут быть также синтезированы при их выращивании на неплоских подложках [3].

Электронные свойства спирального графена анализировались в работах [4–13]. Оказалось, что для спиральных нанолент электронные свойства в первую очередь определяются межслоевыми взаимодействиями, а не деформацией решетки валентных связей. Закрученность наноленты позволяет использовать спиральные (геликоидные) структуры как нанокатушки индуктивности [14, 15].

Механические свойства спиральных нанолент графена как новых нанопружин были рассмотрены в работах [16–20]. Было показано, что геликоидные структуры на основе нанолент графена не только обладают чрезвычайно высокой способностью к растяжению, но и другими уникальными характеристиками, недоступными для традиционных пружин. Резонансы нелинейных колебаний таких структур рассмотрены в работе [21]. Возможность изменения свойств спиральных углеродных нанопружин при их модификации водородом была проанализирова-

\* E-mail: asavin@chph.ras.ru

на в работах [22, 23]. Моделирование теплопроводности спиральных нанолент проводилось в работах [23–26]. Показано, что сжатие и растяжение таких структур может приводить к значительному изменению их теплопроводности.

Акустические солитоны сжатия обычно возбуждаются в твердых телах при их ударном нагружении [27]. Сверхзвуковые акустические солитоны могут двигаться вдоль квазиодномерной спиральной цепи [28]. Акустические уединенные сверхзвуковые плоские волны как точные решения существуют в гексагональной двумерной решетке с потенциалами взаимодействия Леннарда-Джонса [29]. В данной работе будет проведено моделирование движения акустических солитонов сжатия в графеновых геликоидах и спиральных углеродных нанолентах. Будет показано, что акустические сверхзвуковые солитоны могут существовать только в геликоидах, поперечный радиус которых  $R < 6.2 \text{ \AA}$ .

## 2. МОДЕЛЬ

Рассмотрим спиральные молекулярные структуры, полученные из плоских молекул  $l$ -коронен  $C_{6l^2}H_{6l}$  ( $l \geq 2$ ) и  $l$ -кекулен  $C_{6(l^2-1)}H_{l+1}$  ( $l \geq 3$ ), лежащих в плоскости  $xy$ , путем их разрезания по радиусу и дальнейшего спирального продолжения вдоль оси  $z$  (см. рис. 1). Основное однородное состояние таких спиральных структур можно представить как последовательные сдвиги на  $\Delta z$  и повороты на угол  $\Delta\phi \approx \pi/3$  вокруг оси  $z$  мономера из  $N_C$  и  $N_H$  атомов углерода и водорода (для  $l$ -коронена  $N_C = l^2$ ,  $N_H = l$ , для  $l$ -кекулена  $N_C = l^2 - 1$ ,  $N_H = l + 1$ ). При взгляде сверху такие спиральные структуры будут выглядеть как плоские молекулы  $l$ -коронен и  $l$ -кекулен (см. рис. 2 и 3).

При моделировании воспользуемся приближением объединенных атомов — будем рассматривать группу валентно связанных краевых атомов СН как единый атом массы  $M_1 = 13m_p$  с центром, совпадающим с центром атома углерода. Внутренние атомы углерода будут иметь массу  $M_0 = 12m_p$ , где  $m_p = 1.6601 \cdot 10^{-27}$  кг — масса протона. При таком подходе каждая ячейка спирали будет состоять только из  $N_C - N_H$  атомов углерода массы  $M_0$  и  $N_H$  объединенных атомов массы  $M_1$ .

Координаты атомов углерода  $n$ -й ячейки спирали полностью определяются координатами атомов предыдущей ячейки  $n - 1$ :

$$\begin{aligned} x_{n,j,1} &= x_{n-1,j,1} \cos(\Delta\phi) - x_{n-1,j,2} \sin(\Delta\phi), \\ x_{n,j,2} &= x_{n-1,j,1} \sin(\Delta\phi) + x_{n-1,j,2} \cos(\Delta\phi), \end{aligned} \quad (1)$$

$$x_{n,j,3} = x_{n-1,j,3} + \Delta z, \quad j = 1, \dots, N_C,$$

где вектор  $\mathbf{x}_{n,j} = (x_{n,j,1}, x_{n,j,2}, x_{n,j,3})$  задает координаты  $j$ -го атома  $n$ -й элементарной ячейки. Поэтому энергия однородного состояния спирали является функцией  $3N_C + 2$  параметров:  $\{\mathbf{x}_{0,j}\}_{j=1}^{N_C}$ ,  $\Delta\phi$ ,  $\Delta z$ , где вектор  $\mathbf{x}_{0,j} = (x_{0,j,1}, x_{0,j,2}, x_{0,j,3})$  задает координаты  $j$ -го атома нулевой ячейки спирали.

Для моделирования деформации решетки валентных связей воспользуемся силовым полем, в котором разными потенциалами описываются деформации валентных связей и углов, торсионных и двугранных углов и невалентные взаимодействия пар атомов [30, 31]. Ранее это силовое поле (набор потенциалов взаимодействия) использовалось для моделирования углеродных нанолент, нанотрубок и систем молекул фуллеренов [32–34]. В этом силовом поле энергия валентных связей C–C описывается потенциалом

$$V(r) = \epsilon_0 [e^{-\alpha(r-r_0)} - 1]^2, \quad (2)$$

где  $r = |\mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_1|$  — текущая длина связи атомов (векторы  $\mathbf{u}_1$ ,  $\mathbf{u}_2$  задают координаты атомов),  $r_0 = 1.418 \text{ \AA}$  — ее равновесное значение,  $\epsilon_0 = 4.9632 \text{ эВ}$  — энергия связи, параметр  $\alpha = 1.7889 \text{ \AA}^{-1}$  задает жесткость связи  $K = 2\epsilon_0\alpha^2 = 509 \text{ Н/м}$ .

Энергия деформации валентных углов C–C–C описывается потенциалом

$$U(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3) = U(\varphi) = \epsilon_1 (\cos \varphi - \cos \varphi_0)^2, \quad (3)$$

где косинус валентного угла  $\cos \varphi = -(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) / |\mathbf{v}_1| |\mathbf{v}_2|$ , векторы  $\mathbf{v}_1 = \mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_1$ ,  $\mathbf{v}_2 = \mathbf{u}_3 - \mathbf{u}_2$  (векторы  $\mathbf{u}_1$ ,  $\mathbf{u}_2$ ,  $\mathbf{u}_3$  задают координаты атомов углерода, образующих валентный угол),  $\varphi_0 = 120^\circ$  — равновесное значение угла, энергия  $\epsilon_1 = 1.3143 \text{ эВ}$  характеризует жесткость угла. Деформации двугранных и торсионных углов описываются потенциалом

$$W(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3, \mathbf{u}_4) = \epsilon_2 (1 + \cos \phi), \quad (4)$$

где

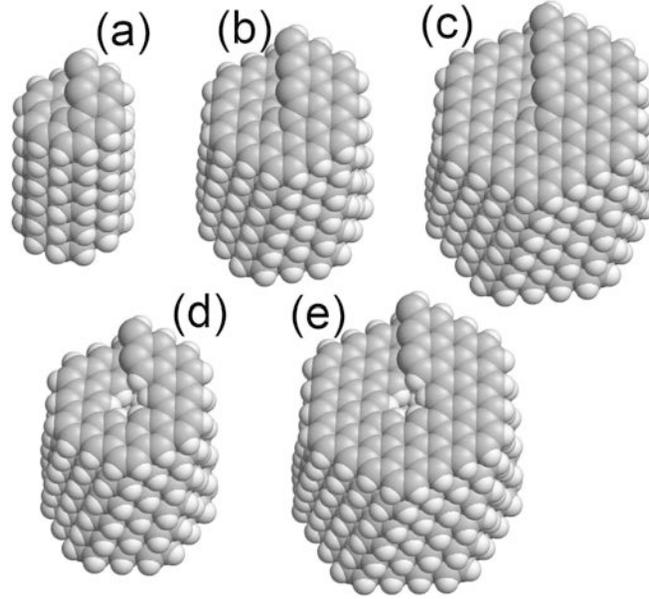
$$\cos \phi = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) / |\mathbf{v}_1| |\mathbf{v}_2|,$$

векторы

$$\mathbf{v}_1 = (\mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_1) \times (\mathbf{u}_3 - \mathbf{u}_2),$$

$$\mathbf{v}_2 = (\mathbf{u}_3 - \mathbf{u}_2) \times (\mathbf{u}_4 - \mathbf{u}_3),$$

энергия  $\epsilon_2 = 0.499 \text{ эВ}$  характеризует жесткость угла (векторы  $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_4$  задают положения атомов, образующих торсионный или двугранный угол).



**Рис. 1.** Геликоид графена (helix  $l$ -helicene  $(C_{l2}H_l)_\infty$ ), построенный из молекулы  $l$ -коронен  $C_{6l2}H_{6l}$ :  $l = 2$  (helix helicene) (a),  $l = 3$  (helix circumhelicene) (b);  $l = 4$  (helix dicircumhelicene) (c). Спиральные наноленты графена (helix  $l$ -kekulene  $(C_{l2-1}H_{l+1})_\infty$ ), построенные из молекулы  $l$ -кекулен  $C_{6(l2-1)}H_{6(l+1)}$ :  $l = 3$  (helix kekulene) (d);  $l = 4$  (helix circumkekulene) (e). Показаны только пять витков спиральной макромолекулы

Обоснование выбранных значений параметров потенциалов взаимодействия (2)–(4) дано в работе [31]. Отметим, что полученные результаты не зависят от вида использованного силового поля. Силовое поля AIREBO [35], использованное в работах [23, 24, 26], будет приводить к тем же результатам.

При использовании этого силового поля гамильтониан бесконечной спиральной структуры имеет вид

$$H = \sum_n \left[ \frac{1}{2} (\mathbf{M} \dot{\mathbf{X}}_n, \dot{\mathbf{X}}_n) + V(\mathbf{X}_{n-1}, \mathbf{X}_n, \mathbf{X}_{n+1}) + W(\mathbf{X}_n, \mathbf{X}_{n+3}, \mathbf{X}_{n+4}, \dots, \mathbf{X}_{n+N_i}) \right], \quad (5)$$

где  $3N_C$ -мерный вектор  $\mathbf{X}_n = \{\mathbf{x}_{n,j}\}_{j=1}^{N_C}$  задает координаты атомов  $n$ -й ячейки спирали. Здесь  $\mathbf{M}$  – диагональная матрица масс. Второе слагаемое в сумме (5) задает энергию валентных (сильных) взаимодействий атомов  $n$ -й ячейки с атомами соседних ячеек, третье слагаемое – энергию невалентных (слабых) взаимодействий атомов ячейки  $n$  с атомами ячеек  $n + 3, \dots, n + N_i$ .

Слабые взаимодействия удаленных ячеек опишем суммой потенциалов Леннарда-Джонса:

$$W(\mathbf{X}_n, \mathbf{X}_{n+3}, \mathbf{X}_{n+4}, \dots, \mathbf{X}_{n+N_i}) =$$

$$= \sum_{k=3}^{N_i} \sum_{j=1}^{N_C} \sum_{i=1}^{N_C} U(r_{n,j;n+k,i}), \quad (6)$$

где

$$r_{n,j;n+k,i} = |\mathbf{x}_{n+k,i} - \mathbf{x}_{n,j}|$$

– расстояние между  $j$ -м атомом  $n$ -й ячейки и  $i$ -м атомом  $(n + k)$ -й ячейки. Потенциал Леннарда-Джонса, описывающий невалентные взаимодействия атомов углерода, имеет вид

$$U(r) = \varepsilon \{ [(r_0/r)^6 - 1]^2 - 1 \}, \quad (7)$$

где  $\varepsilon = 0.002757$  эВ,  $r_0 = 3.807$  Å [36]. При вычислении суммы невалентных взаимодействий (6) будем использовать значение  $N_i = 15$  (дальнейшее увеличение учета дальнего действия не приводит к изменению полученных результатов).

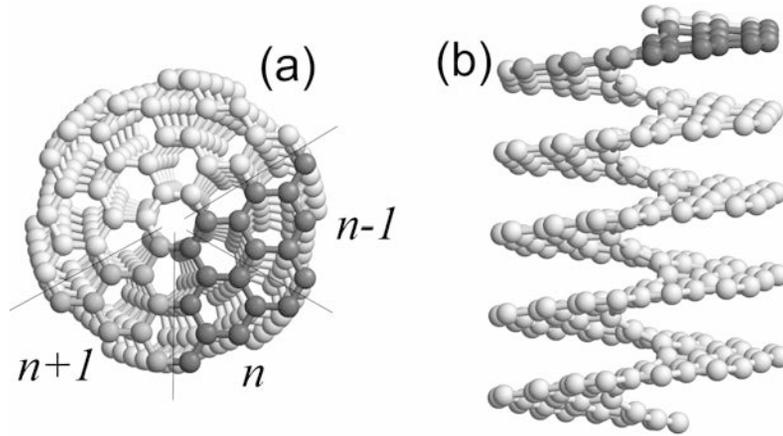
### 3. ДИСПЕРСИОННЫЕ КРИВЫЕ И МАЛОАМПЛИТУДНЫЕ КОЛЕБАНИЯ

Для нахождения основного состояния спирали нужно решить задачу на минимум энергии:

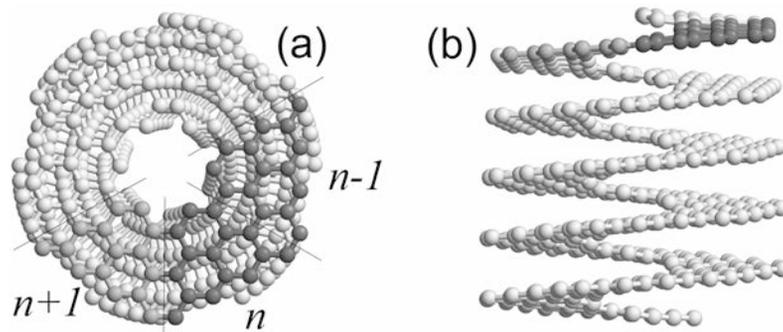
$$P \rightarrow \min : \mathbf{X}_0, \Delta\phi, \Delta z, \quad (8)$$

где потенциальная энергия одного звена спирали

$$P(\mathbf{X}_0, \Delta\phi, \Delta z) = V(\mathbf{X}_{-1}, \mathbf{X}_0, \mathbf{X}_1) + W(\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_3, \dots, \mathbf{X}_{N_i}).$$



**Рис. 2.** (В цвете онлайн) Структура геликоида графена (helix circumhelixene  $(C_9H_3)_\infty$ ,  $l = 3$ ): вид сверху (a) и вид сбоку (b). Элементарные ячейки спиральной макромолекулы выделены цветом,  $n$  — номер ячейки. Атомы водорода не показаны



**Рис. 3.** (В цвете онлайн) Структура спиральной наноленты графена (helix dicircumkekulene  $(C_{15}H_5)_\infty$ ,  $l = 4$ ): вид сверху (a) и вид сбоку (b). Элементарные ячейки спиральной макромолекулы выделены цветом,  $n$  — номер ячейки. Атомы водорода не показаны

Пусть  $\mathbf{X}_0 = \{\mathbf{x}_j^0\}_{j=1}^{N_C}$ ,  $\Delta\phi_0$ ,  $\Delta z_0$  — решение задачи (8), тогда в основном однородном состоянии атомы спиральной макромолекулы будут иметь координаты

$$\begin{aligned} x_{n,j,1}^0 &= x_{j,1}^0 \cos(n\Delta\phi^0) - x_{j,2}^0 \sin(n\Delta\phi^0), \\ x_{n,j,2}^0 &= x_{j,1}^0 \sin(n\Delta\phi^0) + x_{j,2}^0 \cos(n\Delta\phi^0), \\ x_{n,j,3}^0 &= x_{j,3}^0 + n\Delta z^0, \quad j = 1, \dots, N_C, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \end{aligned} \quad (9)$$

Значения продольного  $\Delta z$  и спирального  $\Delta\phi$  шагов спиралей, полученных из плоских молекул  $l$ -коронен и  $l$ -кекулен, приведены в таблице. Радиус спирали совпадает с радиусом молекулы  $l$ -коронен  $R = (l - 0.5)\sqrt{3}r_c$ , где  $r_c = 1.418 \text{ \AA}$  — длина валентной связи С–С. Продольный шаг  $\Delta z \approx 0.58 \text{ \AA}$ , угловой шаг  $\Delta\phi \approx 61^\circ$ . Конкретный вид спиральных структур представлен на рис. 1–3. При построении спирали из молекулы  $l$ -коронен она имеет только один внешний край — сверху такая спираль выгля-

дит как сплошной диск, см. рис. 2. Такая спиральная структура имеет вид винтовой дислокации кристаллического графита. Топологически такая дислокация эквивалентна геликоиду (винтовой поверхности описанной Эйлером в 1774 г.). Поэтому часто такую структуру называют геликоидом графена. При построении спирали из молекулы  $l$ -кекулен она уже имеет два края: внутренний и внешний. Сверху такая спираль имеет вид диска с внутренним отверстием диаметра  $D = 2r_c$ . Фактически данная структура является спиральной углеродной нанолентой с минимальным ненулевым внутренним радиусом. Главное отличие геликоида от спиральной наноленты — наличие жесткой сердцевины (ядра винтовой дислокации).

Для анализа малоамплитудных колебаний удобно использовать локальные цилиндрические координаты  $\mathbf{u}_{n,j} = (u_{n,j,1}, u_{n,j,2}, u_{n,j,3})$ , задаваемые урав-

**Таблица 1.** Значения продольного  $\Delta z$ , углового  $\Delta\phi$  шага, максимальной частоты колебаний  $\omega_m$ , скоростей длинноволновых крутильных  $v_t$  и продольных  $v_l$  фононов для спиральных цепей макромолекулы  $l$ -гелицена  $(C_{l^2}H_l)_\infty$  ( $l = 2, 3, 4, 5$ ) и  $l$ -кекулен  $(C_{l^2-1}H_{l+1})_\infty$  ( $l = 3, 4, 5$ ).

$l$	$\Delta z, \text{Å}$	$\Delta\phi, ^\circ$	$\omega_m, \text{см}^{-1}$	$v_t, \text{м/с}$	$v_l, \text{м/с}$
2	0.5856	60.13	1517	902	3852
3	0.5829	60.80	1569	713	3750
4	0.5792	60.87	1588	608	3726
5	0.5761	60.83	1596	549	3737
3	0.5883	61.16	1528	455	3220
4	0.5806	61.00	1571	466	3474
5	0.5764	60.89	1587	463	3601

нениями

$$\begin{aligned} x_{n,j,1} &= x_{n,j,1}^0 + u_{n,j,1} \cos(n\Delta\phi^0) - u_{n,j,2} \sin(n\Delta\phi^0), \\ x_{n,j,2} &= x_{n,j,2}^0 + u_{n,j,1} \sin(n\Delta\phi^0) + u_{n,j,2} \cos(n\Delta\phi^0), \\ x_{n,j,3} &= x_{n,j,3}^0 + u_{n,j,3}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \end{aligned} \quad (10)$$

В этих координатах гамильтониан спирали можно записать в виде

$$H = \sum_n \left[ \frac{1}{2} (\mathbf{M}\dot{\mathbf{v}}_n, \dot{\mathbf{v}}_n) + P(\mathbf{v}_{n-1}, \mathbf{v}_n, \mathbf{v}_{n+1}, \dots, \mathbf{v}_{n+N_i}) \right], \quad (11)$$

где  $3N_0$ -мерный вектор  $\mathbf{v}_n = \{\mathbf{u}_n, j\}_{j=1}^{N_c}$ .

Гамильтониану (11) соответствует система уравнений движения

$$\begin{aligned} -\mathbf{M}\ddot{\mathbf{v}}_n &= P_1(\mathbf{v}_n, \mathbf{v}_{n+1}, \dots, \mathbf{v}_{n+N_i+1}) + \\ &+ P_2(\mathbf{v}_{n-1}, \mathbf{v}_n, \dots, \mathbf{v}_{n+N_i}) + \dots \\ &\dots + P_{N_i+2}(\mathbf{v}_{n-N_i-1}, \mathbf{v}_{n-N_i}, \dots, \mathbf{v}_n), \end{aligned} \quad (12)$$

$$n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots,$$

где функция

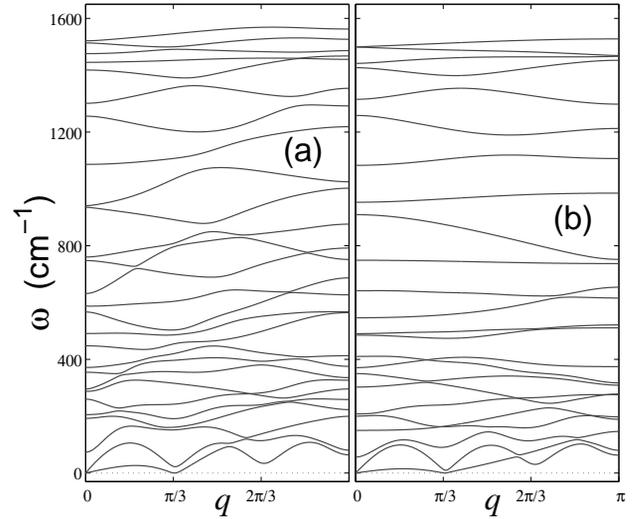
$$P_j(\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_{N_i+2}) = \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}_j}, \quad j = 1, \dots, N_i + 2.$$

В линейном приближении система уравнений (12) принимает вид

$$-\mathbf{M}\ddot{\mathbf{v}}_n = B_0 \mathbf{v}_n + \sum_{k=1}^{N_i+1} (B_k \mathbf{v}_{n+k} + B_k^* \mathbf{v}_{n-k}), \quad (13)$$

где матричные элементы

$$B_k = \sum_{l=1}^{N_i+2-k} P_{l,l+k}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, N_i + 1,$$



**Рис. 4.** Структура дисперсионных кривых спиральных макромолекул circumhelixene  $(C_9H_3)_\infty$  (a) и kekulene  $(C_8H_4)_\infty$  (b). Число дисперсионных кривых 27 (a) и 24 (b)

а матрицы частных производных

$$P_{i,j} = \frac{\partial^2 P}{\partial \mathbf{v}_i \partial \mathbf{v}_j}(\mathbf{0}, \mathbf{0}, \dots, \mathbf{0}), \quad i, j = 1, 2, \dots, N_i + 2.$$

Решение системы линейных уравнений (13) можно найти в стандартной форме

$$\mathbf{v}_n = A \mathbf{w} \exp[i(qn - \omega t)], \quad (14)$$

где  $A$  — амплитуда линейной моды,  $\mathbf{w}$  — собственный вектор,  $\omega$  — частота фонона с безразмерным волновым числом  $q \in [0, \pi]$ . Подставив выражение (14) в систему линейных уравнений (13), получим следующую  $3N_0$ -мерную задачу на собственные значения

$$\omega^2 \mathbf{M} \mathbf{w} = \mathbf{C}(q) \mathbf{w}, \quad (15)$$

где эрмитова матрица

$$\mathbf{C}(q) = B_0 + \sum_{k=1}^{N_i+1} [B_k \exp(ikq) + B_k^* \exp(-ikq)].$$

Используя подстановку  $\mathbf{w} = \mathbf{M}^{-1/2} \mathbf{e}$ , уравнение (15) можно записать в форме

$$\omega^2 \mathbf{e} = \mathbf{M}^{-1/2} \mathbf{C}(q) \mathbf{M}^{-1/2} \mathbf{e}, \quad (16)$$

где  $\mathbf{e}$  — единичный собственный вектор,  $(\mathbf{e}, \mathbf{e}) = 1$ .

Таким образом, для получения дисперсионных кривых  $\omega_j(q)$  нужно найти все собственные значения эрмитовой матрицы (16) при каждом значении

волнового числа  $0 \leq q \leq \pi$ . В результате мы получим  $3N_C$  ветвей дисперсионной кривой  $\{\omega_j(q)\}_{j=1}^{3N_C}$ .

Вид дисперсионных кривых показан на рис. 4. Дисперсионные кривые лежат в интервале частот  $0 \leq \omega \leq \omega_m$ , где максимальная частота  $\omega_m \nearrow 1600 \text{ см}^{-1}$  при увеличении радиуса спирали. Из нулевой точки ( $q = 0, \omega = 0$ ) выходят две дисперсионные кривые  $0 \leq \omega_t(q) \leq \omega_l(q)$ . Первая кривая описывает дисперсию длинноволновых крутильных, а вторая — дисперсию длинноволновых продольных колебаний спирали (крутильные и продольные акустические фононы цепи). Это позволяет найти скорости длинноволновых крутильных и продольных фононов спирали (скорости крутильного и продольного звука)

$$v_t = \Delta z \lim_{q \rightarrow 0} \frac{\omega_t(q)}{q}, \quad v_l = \Delta z \lim_{q \rightarrow 0} \frac{\omega_l(q)}{q}.$$

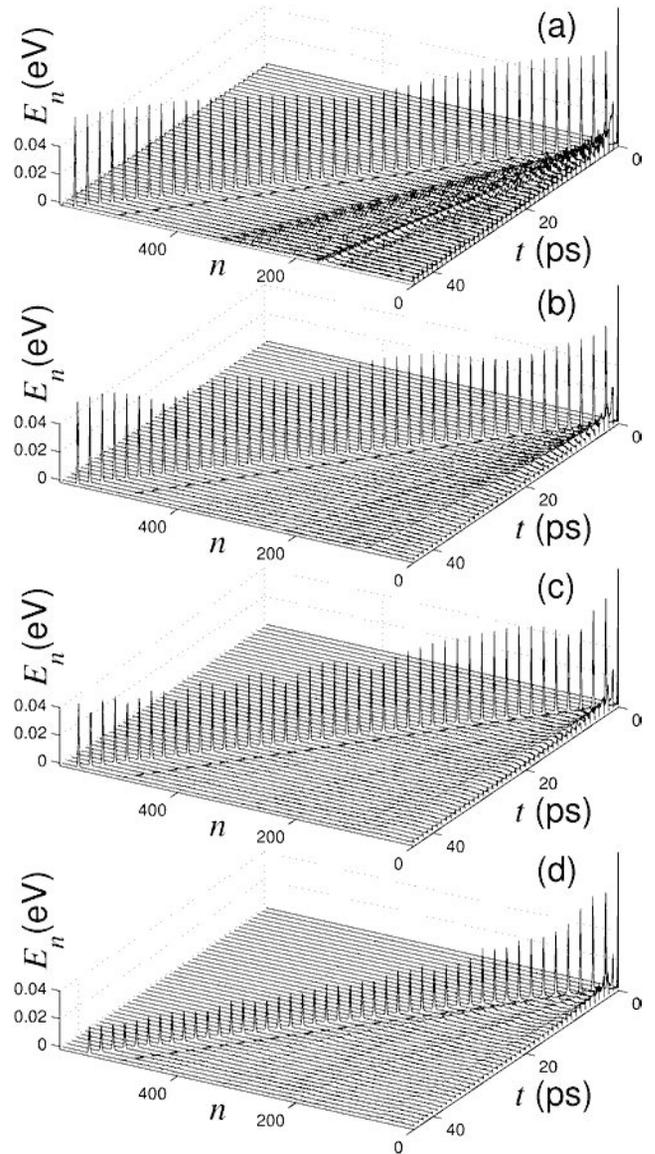
Кроме этого, одна дисперсионная кривая по касательной подходит к оси  $q$  в точке  $q = \pi/3$ . Эта кривая описывает изгибные колебания спирали, имеющие квадратичный закон дисперсии.

Значения максимальной частоты  $\omega_m$  и скоростей звука  $v_t, v_l$  представлены в таблице. Как видно из таблицы, скорость продольного звука всегда более чем в четыре раза больше скорости крутильного звука.

#### 4. АКУСТИЧЕСКИЕ СОЛИТОНЫ

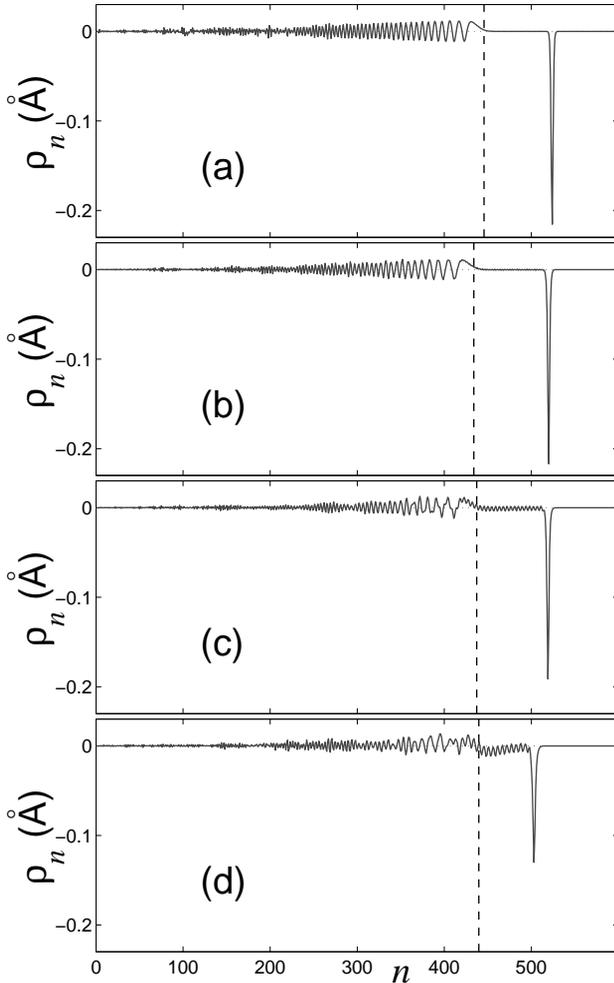
Взаимодействие атомов соседних витков спирали в первую очередь определяется парными невалентными взаимодействиями, описываемыми потенциалом Леннарда-Джонса (7). Нелинейность этого потенциала приводит к жесткому ангармонизму взаимодействия соседних витков спирали при их сближении. Поэтому в графеновой спиральной структуре можно ожидать существования продольных сверхзвуковых акустических солитонов (уединенных волн продольного сжатия спирали, движущихся со скоростями  $v > v_l$ ).

Для проверки существования сверхзвуковых акустических солитонов промоделируем распространение по спирали ее начального локального продольного сжатия. Рассмотрим спираль, состоящую из  $N = 3600$  звеньев. Возьмем ее основное однородное состояние и сдвинем вверх вдоль оси  $z$  на  $a_z$  ее первые  $N_i$  звеньев. В результате на нижнем конце спирали будет создано локальное продольное сжатие. Далее зафиксируем положение  $N_i$  концевых звеньев и рассмотрим распространение по спирали локального сжатия.



**Рис. 5.** Образование сверхзвукового акустического солитона в спиральной макромолекуле  $l$ -гелицена  $(C_{12}H_l)_\infty$  с  $l = 2$  (a), 3 (b), 4 (c) и 5 (d) при продольном локальном сжатии конца спирали на  $a_z = 0.4 \text{ \AA}$ . Показана зависимость от времени  $t$  распределения по цепи энергии  $E_n = \sum_{k=1}^6 e_{(n-1)6+k}$  ( $e_k$  — энергия  $k$ -й элементарной ячейки цепи,  $E_n$  — энергия  $n$ -го витка спирали, число ячеек  $N = 3600$ , число витков  $N_c = N/6 = 600$ ). Штриховая линия показывает траекторию движения со скоростью продольного звука  $v_l t$

Для моделирования динамики спирали с закрепленными концами численно проинтегрируем систему уравнений движения, соответствующую гамиль-



**Рис. 6.** Распределение продольного сжатия  $\{\rho_n = \sum_{k=1}^6 z_{(n-1)6+k}/6\}_{n=1}^{N_c}$  при движении акустического солитона в спиральной макромолекуле  $l$ -гелицена  $(C_{2l}H_l)_\infty$  с  $l = 2$  (a), 3 (b), 4 (c) и 5 (d). Показано распределение относительных продольных смещений витков спирали  $\rho_n$  в момент времени  $t = 40$  пс при амплитуде начального локального сжатия конца цепи  $a_z = 0.4 \text{ \AA}$ . Вертикальная штриховая линия показывает положение фронта волнового пакета акустических фононов  $v_l t$  (общее число элементарных ячеек  $N = 3600$ , число витков спирали  $N_c = N/6 = 600$ )

тониану спирали (5)

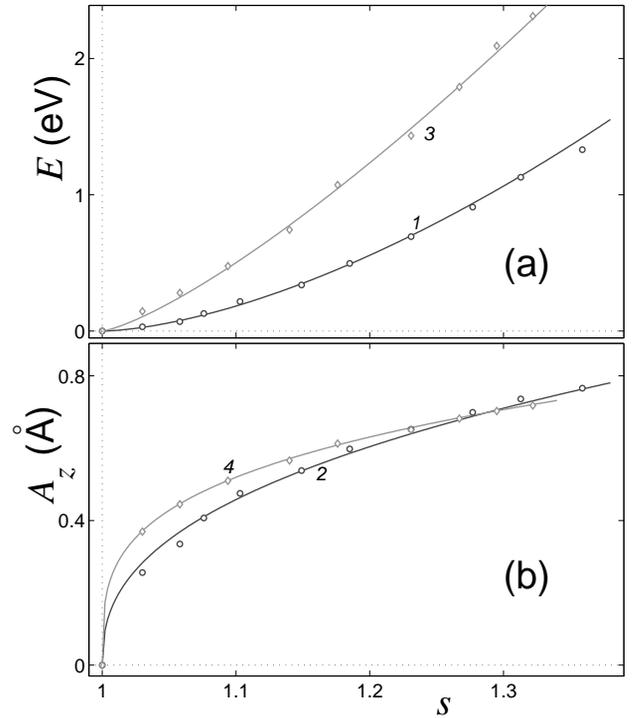
$$M\ddot{\mathbf{X}}_n = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{X}_n}, \quad n = N_i + 1, \dots, N - N_i, \quad (17)$$

$$\dot{\mathbf{X}}_n \equiv \mathbf{0}, \quad n = 1, \dots, N_i, N - N_i + 1, \dots, N,$$

с начальным условием

$$\mathbf{X}_n(0) = \mathbf{X}_n^0 + a_z \mathbf{e}_z, \quad n = 1, 2, \dots, N_i,$$

$$\mathbf{X}_n(0) = \mathbf{X}_n^0, \quad n = N_i + 1, \dots, N, \quad (18)$$



**Рис. 7.** Зависимости энергии  $E$  (a) и амплитуды  $A_z$  (b) акустического солитона продольного сжатия спиральной макромолекулы  $l$ -гелицена  $(C_{2l}H_l)_\infty$  от его безразмерной скорости  $s = v/v_l$  при  $l = 2$  (кривые 1, 3) и  $l = 3$  (кривые 2, 4). Маркеры дают значения, полученные численно, сплошные кривые — зависимости  $E(s) = E_l(s - 1)^{\alpha_l}$ ,  $A_z(s) = A_l(s - 1)^{\beta_l}$ , где  $E_l = 7.3$  (10) эВ;  $\alpha_l = 1.6$  (1.3);  $A_l = 0.4$  (0.28)  $\text{\AA}$ ,  $\beta_l = 0.4$  (0.28) для  $l=2$  (3)

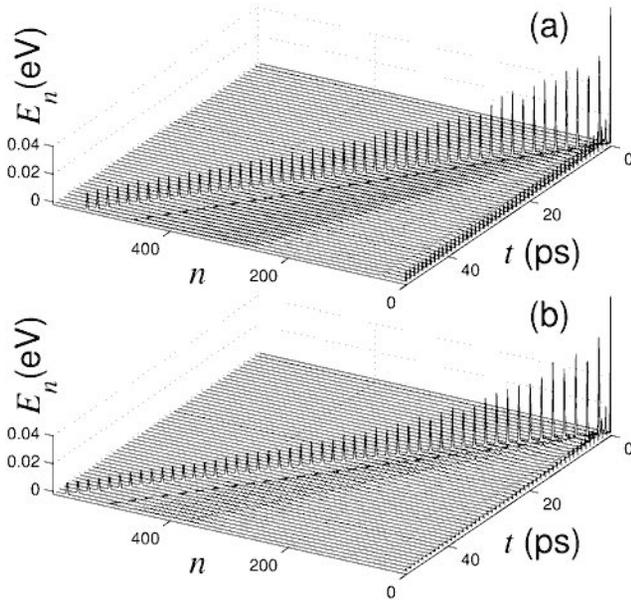
$$\dot{\mathbf{X}}_n(0) = \mathbf{0}, \quad n = 1, 2, \dots, N,$$

где  $3N_c$ -мерный вектор

$$\mathbf{X}_n = \{(x_{n,j,1}, x_{n,j,2}, x_{n,j,3})\}_{j=1}^{N_c}$$

задает координаты атомов  $n$ -й ячейки спирали, а вектор  $\{\mathbf{X}_n^0\}_{n=1}^N$  задает основное состояние спирали,  $\mathbf{e}_z$  — единичный вектор, направленный вдоль оси  $z$ ,  $a_z > 0$  — амплитуда начального продольного сжатия спирали.

Численное интегрирование системы уравнений движения (17) показало, что начальное продольное сжатие конца спирали с амплитудой  $a_z \leq 0.6 \text{ \AA}$  приводит к образованию сверхзвукового акустического солитона и дозвукового волнового пакета длинноволновых продольных акустических солитонов только для спиралей, полученных из плоских молекул  $l$ -гелицена (для спиральных макромолекул  $l$ -гелицена) с  $l < 4$  (см. рис. 5 a, b и рис. 6 a, b)). Здесь локальная область сжатия движется вдоль спирали



**Рис. 8.** Торможение сверхзвукового акустического солитона в спиральной макромолекуле  $l$ -кекулена  $(C_{l2-1}H_{l+1})_{\infty}$  с  $l=3$  (a) и 4 (b) при продольном локальном сжатии конца цепи на  $a_z = 0.4 \text{ \AA}$ . Показана зависимость от времени  $t$  распределения по цепи энергии  $E_n = \sum_{k=1}^6 e_{(n-1)6+k}$  ( $e_k$  — энергия  $k$ -й элементарной ячейки цепи,  $E_n$  — энергия  $n$ -го витка спирали, число ячеек  $N = 3600$ , число витков  $N_c = N/6 = 600$ ). Штриховая линия показывает траекторию движения со скоростью продольного звука  $v_l t$

с постоянной сверхзвуковой скоростью  $v > v_l$  и сохраняет свою форму. При движении солитон отрывается от волнового пакета фононов. Это позволяет найти его энергию  $E$  и продольное сжатие спирали  $A_z$ :

$$E = \sum_n E_n, \quad A_z = \sum_n z_n,$$

где суммирование происходит только по области локализации солитона, локальное сжатие

$$z_n = \sum_{j=1}^{N_c} (x_{n+6,j,3} - x_{n,j,3} - 6\Delta_z) / N_c.$$

Акустический солитон в спирали может двигаться с безразмерной скоростью  $1 < s < 1.4$ . Зависимости энергии  $E$  и амплитуды  $A_z$  солитона от его безразмерной скорости  $s = v/v_l$  показаны на рис. 7. Как видно из рисунка, с ростом скорости для спиральных макромолекул  $l$ -гелицена при  $l = 2$  растут как энергия солитона,  $E(s) \propto (s - 1)^{1.6}$ , так и его амплитуда,  $A_z \propto (s - 1)^{0.4}$ . Для спирали с  $l = 3$  энергия уже растет по закону  $E(s) \propto (s - 1)^{1.3}$ , а амплитуда — по закону  $A_z \propto (s - 1)^{0.28}$ . Отметим, что

в одномерной цепи Леннарда-Джонса акустический солитон может двигаться со сверхзвуковыми значениями скорости  $s > 1$ , при увеличении скорости его энергия растет как квадрат скорости,  $E(s) \propto (s - 1)^2$ .

Для спиралей большого диаметра (при  $l \geq 4$ ) локальное продольное сжатие конца спирали тоже приводит к образованию сверхзвуковой локализованной области сжатия. Но движение этой области всегда сопровождается излучением фононов. В результате этого энергия и скорость солитона монотонно уменьшаются (см. рис. 5 c, d). Чем больше диаметр спирали, тем заметнее излучение фононов (см. рис. 6 c, d). Поэтому можно заключить, что геликоид графена (спиральная макромолекула  $l$ -гелицена) допускает существование акустического солитона продольного сжатия только при  $l = 2, 3$  (только при радиусе спирали  $R \leq 6.14 \text{ \AA}$ ). При  $l > 3$  (при  $R > 6.14 \text{ \AA}$ ) существуют только солитоноподобные возбуждения, обладающие конечным временем жизни.

Численное интегрирование системы уравнений движения (17) также показало что в спиральной макромолекуле  $l$ -кекулена, т. е. в спиральной наноленте графена, локальное продольное сжатие конца спирали приводит к образованию сверхзвуковой локализованной области, движение которой всегда сопровождается интенсивным излучением фононов (см. рис. 8). Чем больше диаметр спиральной наноленты, тем интенсивнее происходит излучение фононов. Излучение фононов приводит к быстрому торможению солитона сжатия.

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенное численное моделирование динамики углеродных спиральных структур показывает, что геликоид графена поддерживает распространение акустических сверхзвуковых солитонов продольного сжатия только для структур с поперечным радиусом  $R < 0.62 \text{ нм}$ . Здесь солитоны могут двигаться без излучения фононов при безразмерной скорости  $1 < s < 1.4$ . В геликоидах большого радиуса и в спиральных углеродных нанолентах любого радиуса движение солитоноподобного возбуждения всегда сопровождается излучением фононов (чем больше радиус спиральной структуры, тем интенсивнее излучение).

**Финансирование.** Научно-исследовательская работа выполнена за счет субсидии, выделенной

ФИЦ ХФ РАН на выполнение государственного задания, тема FFZE-2022-0009 (регистрационный номер 122040500069-7). Вычислительные ресурсы предоставлены межведомственным суперкомпьютерным центром РАН.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Y. Nakakuki, T. Hirose, H. Sotome, H. Miyasaka, and K. Matsuda, *J. Amer. Chem. Soc.* **140**, 4317 (2018); <https://doi.org/10.1021/jacs.7b13412>.
2. Y. Nakakuki, T. Hirose, and K. Matsuda, *J. Amer. Chem. Soc.* **140**, 15461 (2018); <https://doi.org/10.1021/jacs.8b09825>.
3. Y. Zhao, C. Zhang, D. D. Kohler, J. M. Scheeler, J. C. Wright, P. M. Voyles, and S. Jin, *Science* **370**, 442 (2020); <https://doi.org/10.1126/science.abc4284>.
4. S. Avdoshenko, P. Koskinen, H. Sevincli, A. A. Popov, and C. G. Rocha, *Sci. Rep.* **3**, 1632 (2013); <https://doi.org/10.1038/srep01632>.
5. T. Korhonen and P. Koskinen, *AIP Advances* **4**, 127125 (2014); <https://doi.org/10.1063/1.4904219>.
6. X. Zhang and M. Zhao, *Sci. Rep.* **4**, 5699 (2014); <https://doi.org/10.1038/srep05699>.
7. V. Atanasov and A. Saxena, *Phys. Rev. B* **92**, 035440 (2015); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.035440>.
8. X. Xu, B. Liu, W. Zhao, Y. Jiang, L. Liu, W. Li, G. Zhang, and W. Q. Tian, *Nanoscale* **9**, 9693 (2017); <https://doi.org/10.1039/C7NR03432F>.
9. J. Tan, X. Zhang, W. Liu, X. He, and M. Zhao, *Nanotechnology* **29**, 205202 (2018); <https://doi.org/10.1088/1361-6528/aab1d9>.
10. V. V. Porsev, A. V. Bandura, S. I. Lukyanov, and R. A. Evarestov, *Carbon* **152**, 755 (2019); <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2019.06.036>.
11. Z.-P. Liu, Y.-D. Guo, X.-H. Yan, H.-L. Zeng, X.-Y. Mou, Z.-R. Wang, and J.-J. Wang, *J. Appl. Phys.* **126**, 144303 (2019); <https://doi.org/10.1063/1.5118738>.
12. R. Thakur, P. K. Ahluwalia, A. Kumar, and R. Sharma, *Physica E* **129**, 114638 (2021); <https://doi.org/10.1016/j.physe.2021.114638>.
13. Z. Zhou, L. Yan, X.-M. Wang, D. Zhang, and J.-Y. Yan, *Results Phys.* **35**, 105351 (2022); <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2022.105351>.
14. F. Xu, H. Yu, A. Sadrzadeh, and B. I. Yakobson, *Nano Lett.* **16**, 34 (2016); <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.5b02430>.
15. V. Porsev and R. Evarestov, *Nanomaterials* **13**, 415 (2023); <https://doi.org/10.3390/nano13030415>.
16. P. Sestak, J. Wu, J. He, J. Pokluda, and Z. Zhang, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17**, 18684 (2015); <https://doi.org/10.1039/c5cp02043c>.
17. H. Zhan, Y. Zhang, C. Yang, G. Zhang, and Y. Gu, *Carbon* **120**, 258 (2017); <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2017.05.044>.
18. H. Zhan, G. Zhang, C. Yang, and Y. Gu, *Nanoscale* **10**, 18961 (2018); <https://doi.org/10.1039/C8NR04882G>.
19. S. Norouzi and M. M. S. Fakhrabadi, *Appl. Phys. A* **125**, 321 (2019); <https://doi.org/10.1007/s00339-019-2623-8>.
20. C. Zhu, J. Ji, Z. Zhang, S. Dong, N. Wei, and J. Zhao, *Mech. Mater.* **153**, 103683 (2021); <https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2020.103683>.
21. R. Liu, J. Zhao, L. Wang, and N. Wei, *Nanotechnology* **31**, 025709 (2020); <https://doi.org/10.1088/1361-6528/ab4760>.
22. A. Sharifian, A. Moshfegh, A. Javadzadegan, H. H. Afrouzi, M. Baghani, and M. Baniassadi, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21**, 12423 (2019); <https://doi.org/10.1039/C9CP01361J>.
23. H. Li, H. H. Afrouzi, M. M. A. Zahra, B. S. Bashar, F. Fathdal, S. K. Hadrawi, A. Alizadeh, M. Hekmatifar, K. Al-Majdi, and I. Alhani, *Colloids Surf. A: Physicochem. Eng. Asp.* **656**, 130324 (2023); <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2022.130324>.
24. H. Zhan, G. Zhang, C. Yang, and Y. T. Gu, *Phys. Chem. C* **122**, 7605 (2018); <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b00868>.
25. S. Norouzi and M. M. S. Fakhrabadi, *J. Phys. Chem. Sol.* **137**, 109228 (2020); <https://doi.org/10.1016/j.jpcs.2019.109228>.
26. A. Sharifian, T. Karbaschi, A. Rajabpour, M. Baghani, J. Wu, and M. Baniassadi, *Int. J. Heat Mass Transfer* **189**, 122719 (2022); <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2022.122719>.
27. V. F. Nesterenko, *Philos. Trans. Royal Soc. A* **376**, 2127 (2018); <https://doi.org/10.1098/rsta.2017.0130>.
28. P. L. Christiansen, A. V. Zolotaryuk, and A. V. Savin, *Phys. Rev. E* **56**, 877 (1997); <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.56.877>.

- 29.** Y. Zolotaryuk, A. V. Savin, and P. L. Christiansen, *Phys. Rev. B* **57**, 14213 (1998); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.57.14213>.
- 30.** W. D. Cornell, W. P. Cieplak, C. I. Bayly, I. R. Gould, K. M. Merz, D. M. Ferguson, D. C. Spellmeyer, T. Fox, J. W. Caldwell, and P. A. Kollman, *J. Amer. Chem. Soc.* **117**, 5179 (1995); <https://doi.org/10.1021/ja00124a002>.
- 31.** A. V. Savin, Yu. S. Kivshar, and B. Hu, *Phys. Rev. B* **82**, 195422 (2010); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.195422>.
- 32.** A. V. Savin and Y. S. Kivshar, *Appl. Phys. Lett.* **98**, 193106 (2011); <https://doi.org/10.1063/1.3590256>.
- 33.** A. V. Savin and Y. S. Kivshar, *Phys. Rev. B* **85**, 125427 (2012); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.125427>.
- 34.** A. V. Savin and Y. S. Kivshar, *Sci. Rep.* **7**, 4668 (2017); <https://10.1038/s41598-017-04987-w>.
- 35.** S. J. Stuart, A. B. Tutein, and J. A. Harrison, *J. Chem. Phys.* **112** (14), 6472 (2000); <https://doi.org/10.1063/1.481208>.
- 36.** R. Setton, *Carbon* **34**(1), 69 (1996); [https://doi.org/10.1016/0008-6223\(95\)00136-0](https://doi.org/10.1016/0008-6223(95)00136-0).

# АНТИФЕРРОМАГНИТНАЯ МОДЕЛЬ ПОТТСА НА ОБЪЕМНО–ЦЕНТРИРОВАННОЙ КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ

*Д. Р. Курбанова\**, *М. К. Рамазанов*, *М. А. Магомедов*, *А. К. Муртазаев*

*Институт физики им. Х.И. Амирханова  
Дагестанского федерального исследовательского центра Российской академии наук  
367015, Матачкала, Россия*

Поступила в редакцию 16 декабря 2022 г.,  
после переработки 26 января 2023 г.  
Принята к публикации 1 февраля 2023 г.

Методом Монте-Карло выполнены исследования фазовых переходов и термодинамических свойств антиферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  на объемно-центрированной кубической решетке. Исследования проведены с учетом обменных взаимодействий первых  $J_1$  и вторых ближайших соседей  $J_2$ . Гистограммным методом проведен анализ порядка фазовых переходов. Установлено, что в исследуемой модели при  $J_2 = 0$  наблюдается фазовый переход второго рода. Обнаружено, что учет антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей приводит к смене типа фазового перехода.

DOI: 10.31857/S004445102306007X  
EDN: DFLBSC

## 1. ВВЕДЕНИЕ

При изучении характера фазовых переходов модели Поттса с различным числом состояний спина  $q$  в большинстве случаев рассматривались системы с ферромагнитными взаимодействиями между ближайшими соседями. В зависимости от числа состояний спина  $q$  и пространственной размерности модель Поттса демонстрирует температурный фазовый переход (ФП) первого или второго рода. Критические свойства ферромагнитной модели Поттса достаточно хорошо изучены в двумерном случае [1, 2]: при  $q > 4$  система демонстрирует ФП первого порядка, в то время как при  $q \leq 4$  переход непрерывен. Для трехмерного случая известно, что при  $q > 3$  в системе наблюдается ФП первого рода. Поведение антиферромагнитной модели Поттса считается более сложной, поскольку сильно зависит от микроструктуры решетки. Результаты исследований трехмерной антиферромагнитной модели Поттса для  $q = 3$  и  $q = 4$  на простой кубической решетке показывают, что в данной модели наблюдается ФП второго рода, тогда как для  $q = 5$  наблюдается нулевой темпера-

турный переход, а для  $q = 6$  нет порядка ни при каких температурах [3].

В отличие от ферромагнитной модели Поттса, которая достаточно хорошо изучена благодаря ее универсальности, для антиферромагнитной модели ввиду большого разнообразия критического поведения системы многие вопросы должны быть исследованы в каждом конкретном случае отдельно. Эти вопросы связаны с изучением природы и характера ФП, влияния внешних возмущающих факторов на критические и термодинамические свойства и др.

Отдельный интерес представляет то, что в антиферромагнитной модели Поттса плотность энтропии основного состояния остается ненулевой без фрустрации. Ненулевая энтропия основного состояния  $S_0 \neq 0$  является важным предметом статистической механики. Одним из физических примеров является спиновый лед. В работе [4] изучено  $(q, r)$ -состояние Поттса, которое представляет собой модель Поттса с различным числом состояний спина  $q$  с невидимыми состояниями  $r$ . Термин «невидимый» означает дополнительное энергетическое вырождение, которое влияет только на энтропию, но не вносит вклада в энергию взаимодействия. Эту модель можно рассматривать как прямое расширение стандартной ферромагнитной модели Поттса. Однако из-за эффекта невидимых состояний в двумерном случае для  $q = 2$ ,  $q = 3$  и  $q = 4$  может возникнуть ФП первого рода со спонтанным нарушением сим-

\* E-mail: d\_kurbanova1990@mail.ru

метрии. Для каждого значения  $q$  существует критическое значение  $r$ , которое может привести к смене типа ФП [5].

Повышенный интерес к изучению модели Поттса связан с тем, что эта модель описывает большой класс реальных физических систем: слоистые магнетики, пленки жидкого гелия, сверхпроводящие пленки, адсорбированные пленки и др. [3, 6, 7]. Результаты, полученные для двумерной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 2$ ,  $q = 3$  и  $q = 4$  на разных типах решеток, показывают, что многие физические свойства модели Поттса также зависят от величины взаимодействия вторых соседей  $J_2$  [8–18]. Исследование трехмерной антиферромагнитной модели Поттса на объемно-центрированной кубической (ОЦК) решетке с учетом конкуренции обменных взаимодействий в литературе практически не встречается. Учет взаимодействия вторых ближайших соседей в данной модели может привести к фрустрации, вырождению основного состояния, появлению различных фаз и ФП, а также влиять на его термодинамические, магнитные и критические свойства. В связи с этим, в данной работе нами предпринята попытка на основе репличного алгоритма и алгоритма Ванга–Ландау метода Монте-Карло (МК) провести исследование ФП и термодинамических свойств трехмерной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  на ОЦК-решетке с антиферромагнитным взаимодействием первых и вторых ближайших соседей. Выбор ОЦК-решетки в данном исследовании связан еще с тем, что результаты исследований модели Изинга и Гейзенберга на ОЦК-решетке показали отсутствие фрустраций при различных соотношениях обменных взаимодействий первых и вторых ближайших соседей [19–21]. Исследования проводятся на основе современных методов и идей, что позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с природой ФП и термодинамическим поведением систем с конкурирующими обменными взаимодействиями.

## 2. МОДЕЛЬ И МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ

Гамильтониан модели Поттса с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей может быть представлен в следующем виде:

$$\begin{aligned}
 H &= -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq j} S_i S_j - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle, i \neq k} S_i S_k \\
 &= -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq j} \cos \theta_{i,j} - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle, i \neq k} \cos \theta_{i,k},
 \end{aligned}
 \tag{1}$$

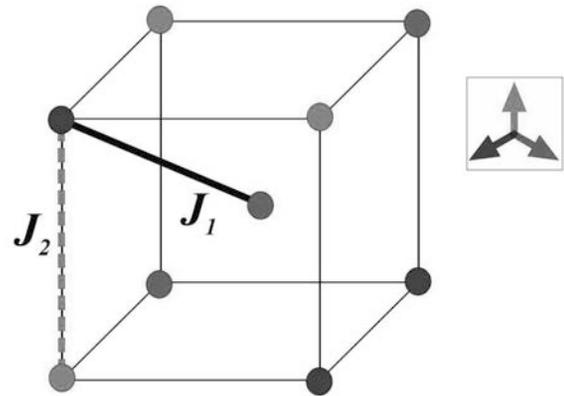


Рис. 1. Схематическое представление трехвершинной модели Поттса на ОЦК-решетке

где  $J_1$  и  $J_2$  – параметры обменных взаимодействий первых ( $J_1 = -1$ ) и вторых ( $J_2 = -1$ ) ближайших соседей,  $\theta_{i,j}$ ,  $\theta_{i,k}$  – углы между взаимодействующими спинами  $S_i - S_j$  и  $S_i - S_k$ .

Схематическое представление модели Поттса с  $q = 3$  на ОЦК-решетке приведено на рис. 1. На вставке приведены направления для каждого из 3 значений спина и соответствующее цветовое представление. На рисунке также представлены взаимодействия между первыми  $J_1$  и вторыми  $J_2$  ближайшими соседями.

Направления спинов заданы таким образом, что выполняется равенство

$$\begin{aligned}
 \theta_{i,j} &= \begin{cases} 0, & \text{если } S_i = S_j, \\ 120^\circ, & \text{если } S_i \neq S_j, \end{cases} \\
 \cos \theta_{i,j} &= \begin{cases} 1, & \text{если } S_i = S_j, \\ -1/2, & \text{если } S_i \neq S_j. \end{cases}
 \end{aligned}
 \tag{2}$$

Согласно уравнению (2), для двух спинов  $S_i$  и  $S_j$  энергия парного обменного взаимодействия  $E_{i,j} = -J_1$ , если  $S_i = S_j$ . В случае, когда  $S_i \neq S_j$ , энергия  $E_{i,j} = J_1/2$ . Таким образом, энергия парного взаимодействия спинов равна одной величине при их одинаковом направлении и принимает другое значение при не совпадении направлений спинов.

В настоящее время такие системы на основе микроскопических гамильтонианов успешно изучаются на основе метода МК [22–24]. В последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов метода МК. Одними из наиболее эффективных для исследования подобных систем является репличный обменный алгоритм [25] и алгоритм Ванга–

Ландау [26, 27]. Репличный обменный алгоритм эффективен для исследования систем с большими линейными размерами и в критической области, а алгоритм Ванга–Ландау – в низкотемпературной области. В данном исследовании были использованы оба алгоритма.

Алгоритм Ванга–Ландау позволяет получить магнитные структуры основного состояния системы. Данный алгоритм является реализацией метода энтропийного моделирования и позволяет вычислить функцию плотности состояний системы. Алгоритм Ванга–Ландау основан на том, что, совершая случайное блуждание в пространстве энергий с вероятностями, обратно пропорциональными плотности состояний  $g(E)$ , мы получаем равномерное распределение по энергиям. Подбрав вероятности перехода такими, что посещение всех энергетических состояний стало бы равномерным, можно получить изначально неизвестную плотность состояний  $g(E)$ , зная которую, можно вычислить значения необходимых термодинамических параметров при любой температуре. Поскольку плотность состояний  $g(E)$  очень быстро растет с увеличением размеров исследуемых систем, для удобства хранения и обработки больших чисел пользуются величиной  $\ln g(E)$ .

Алгоритм Ванга–Ландау был использован нами в следующем виде.

Задается произвольная начальная конфигурация спинов. Стартовые значения плотности состояний  $g(E) = 1$ , гистограммы распределений по энергиям  $H(E) = 0$ , стартовый модификационный фактор  $f = f_0 = e^1 \approx 2.71828$ . Многократно совершаем шаги в фазовом пространстве, пока не получим относительно плоскую гистограмму  $H(E)$  (т.е. пока не будут посещены примерно одинаковое количество раз все возможные энергетические состояния системы). При этом вероятность перехода из состояния с энергией  $E_1$  в состояние с энергией  $E_2$  определяется по формуле  $p = g(E_1)/g(E_2)$ . Если переход в состояние с энергией  $E_2$  состоялся, то  $g(E_2) \rightarrow f \times g(E_2)$ ,  $H(E_2) \rightarrow H(E_2) + 1$ , иначе  $g(E_1) \rightarrow f \times g(E_1)$ ,  $H(E_1) \rightarrow H(E_1) + 1$ . Если гистограмма стала "плоской", то обнуляем гистограмму  $H(E) \rightarrow 0$ , уменьшаем модификационный фактор  $f \rightarrow \sqrt{f}$  и продолжаем снова, пока  $f \geq f_{min}$ . В нашем случае  $f_{min} = 1.0000000001$ . Таким образом, определив плотность состояний системы, можно рассчитать значения термодинамических параметров при любой температуре. В частности, внутреннюю энергию  $U$ , свободную энергию  $F$ , удельную теплоемкость  $C$  и энтропию  $S$  можно вычислить, ис-

пользуя следующие выражения:

$$U(T) = \frac{\sum_E E g(E) e^{-E/k_B T}}{\sum_E g(E) e^{-E/k_B T}} \equiv \langle E \rangle_T, \quad (3)$$

$$F(T) = -k_B T \ln \left( \sum_E g(E) e^{-E/k_B T} \right), \quad (4)$$

$$C(T) = \left( \frac{|J_1|/k_B T}{N} \right) (\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2), \quad (5)$$

$$S(T) = \frac{U(T) - F(T)}{T}, \quad (6)$$

где  $K = |J_1|/k_B T$ ,  $N$  – число частиц,  $T$  – температура (здесь и далее температура дана в единицах  $|J_1|/k_B$ ).

Репличный обменный алгоритм был использован нами в следующем виде [25]:

1. Одновременно моделируются  $N$  реплик  $X_1, X_2, \dots, X_N$  с температурами  $T_1, T_2, \dots, T_N$ .

2. После выполнения одного МК-шага/спин для всех реплик проводится обмен данными между парой соседних реплик  $X_i$  и  $X_{i+1}$  в соответствии со схемой Метрополиса с вероятностью

$$\omega(X_i \rightarrow X_{i+1}) = \begin{cases} 1, & \text{если } \Delta \leq 0, \\ \exp(-\Delta), & \text{если } \Delta > 0, \end{cases}$$

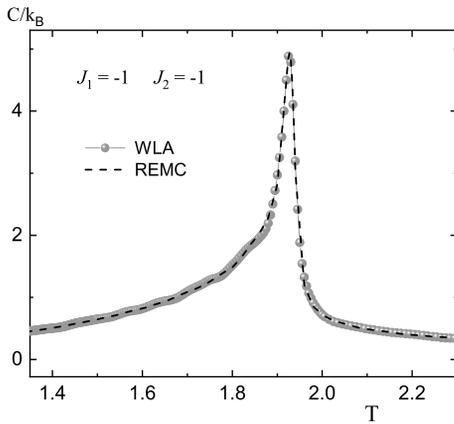
где  $\Delta = (U_i - U_{i+1})(1/T_i - 1/T_{i+1})$ ,  $U_i$  и  $U_{i+1}$  – внутренние энергии реплик.

Главное преимущество этого алгоритма в том, что вероятность обмена априори известна, тогда как для других алгоритмов определение вероятности процедура достаточно длительная и отнимает много времени. В репличном обменном алгоритме для каждой реплики реализуется случайное блуждание по «температурному интервалу», которая, в свою очередь, стимулирует случайное блуждание в поле потенциальной энергии. Это облегчает решение проблемы «застревания» системы в многочисленных состояниях с локальной минимальной энергией, которая характерна для спиновых систем с фрустрациями.

Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями и линейными размерами  $2 * L \times L \times L = N$ ,  $L = 8 - 64$ .

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

На рис. 2 приведены температурные зависимости теплоемкости  $C$  при  $J_1 = -1$  и  $J_2 = -1$ , по-



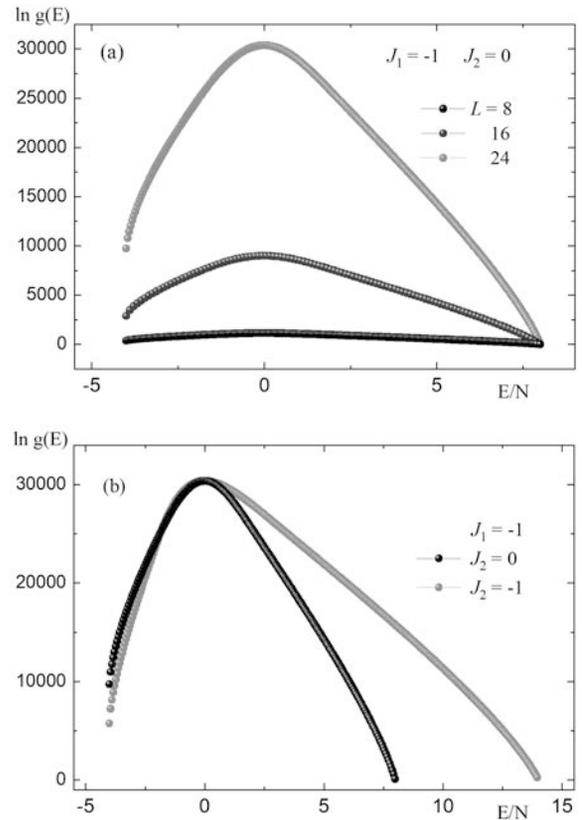
**Рис. 2.** Температурные зависимости теплоемкости  $C$  при  $J_1 = -1$  и  $J_2 = -1$  с линейными размерами  $L = 24$ , полученные репличным алгоритмом (REMC) и алгоритмом Ванга–Ландау (WLA)

лученные на основе репличного алгоритма и алгоритма Ванга–Ландау метода МК (здесь и далее статистическая погрешность не превышает размеров символов, использованных для построения зависимостей). Как видно на рисунке, вблизи критической температуры наблюдается ярко выраженные максимумы теплоемкости. Данные, полученные разными алгоритмами, достаточно хорошо соответствуют друг другу, что позволяет говорить о надежности полученных результатов.

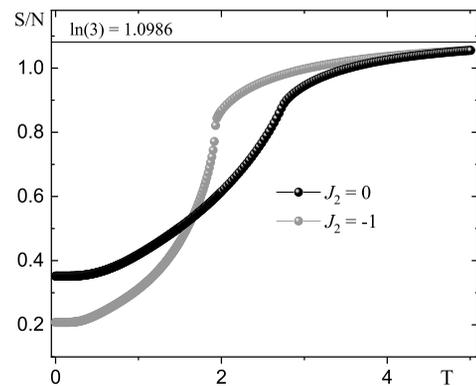
На рис. 3 *a* приведены плотности состояний системы для  $J_2 = 0$  при различных линейных размерах  $L = 8, 16, 24$ . С ростом линейных размеров системы плотность состояний  $g(E)$  значительно возрастает, что связано с вырождением основного состояния, причем вырождение наблюдается как с учетом взаимодействий вторых соседей, так и без них. На рис. 3 *b* видно, что вырождение основного состояния уменьшается при учете взаимодействия вторых соседей  $J_2 = -1$ .

На рис. 4 приведены температурные зависимости энтропии  $S/N$  для разных величин обменного взаимодействия  $J_2$ . Видно, что при увеличении температуры энтропия для всех систем стремится к теоретически предсказанному значению  $\ln 3$ . При низких температурах энтропия стремится к ненулевому значению. Ненулевая остаточная энтропия является следствием вырождения основного состояния.

Для анализа порядка ФП нами использован гистограммный анализ данных метода МК. Гистограммный анализ — один из наиболее точных ме-



**Рис. 3.** Плотность состояний  $g(E)$  для разных значений  $J_2$



**Рис. 4.** Температурная зависимость энтропии  $S$  при  $J_1 = -1$  и разных значениях  $J_2$

тодов, позволяющих установить род ФП [26,28,29].

На рис. 5 и 6 представлены гистограммы распределения энергии для случаев  $J_2 = 0$  и  $J_2 = -1$  с различными линейными размерами. Графики по-

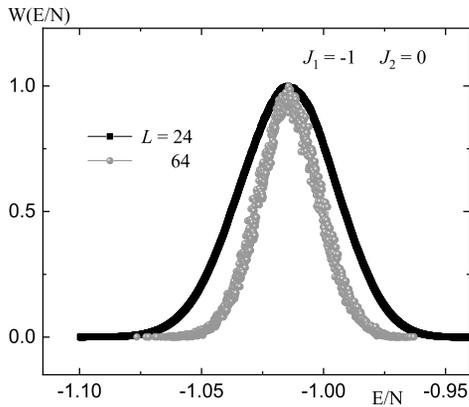


Рис. 5. Гистограмма распределения энергии для  $J_2 = 0$  при  $L = 24, 64$

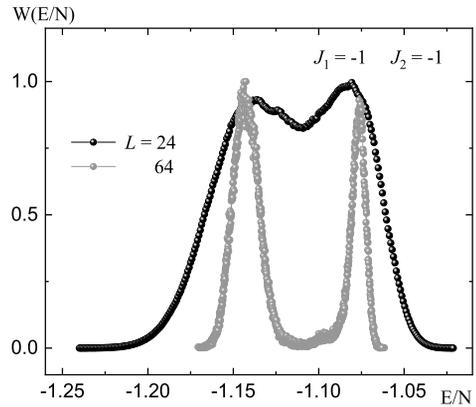


Рис. 6. Гистограмма распределения энергии для  $J_2 = -1$  при  $L = 24, 64$

строены при критической температуре. На рис. 5 видно, что в зависимости вероятности  $W$  от энергии  $E/N$  для  $J_2 = 0$  при  $L = 24$  и  $64$  наблюдается один максимум, что характерно для ФП второго рода ( $T_N = 2.728(5)$ ). На рис. 6 представлены гистограммы распределения энергии для систем с линейными размерами  $L = 24$  и  $64$  при  $J_2 = -1$ . Наблюдается бимодальное распределение энергии. С ростом линейных размеров системы мы наблюдаем увеличение расстояния между пиками. Наличие двойного пика на гистограммах распределения энергии является характерным признаком ФП первого рода ( $T_N = 1.925(2)$ ). Таким образом, учет антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей в данной модели приводит к смене типа фазового перехода, что также подтверждает поведение энтропии. На рис. 4 продемонстрировано типичное непрерывное поведение энтропии при фазовом переходе второго рода для  $J_2 = 0$  и характерное скачкообразное поведение в критической точке при фазовом переходе первого рода для  $J_2 = -1$ .

Смена типа ФП также подтверждается данными, показанными на рис. 7, где приведена временная динамика изменения внутренней энергии в ходе компьютерного моделирования для системы с линейными размерами  $L = 64$  при  $J_2 = -1$ . По горизонтальной оси отложено количество МК-шагов на спин (NMCS). Результаты приведены для трех температур: в точке ФП ( $T_N = 1.925$ ), а также выше и ниже критической температуры ( $T = 1.920$  и  $T = 1.930$ ). В точке ФП имеются два метастабильных энергетических уровня  $E_1 = -1.1426$  и  $E_2 = -1.0769$ . Система совершает случайные флук-

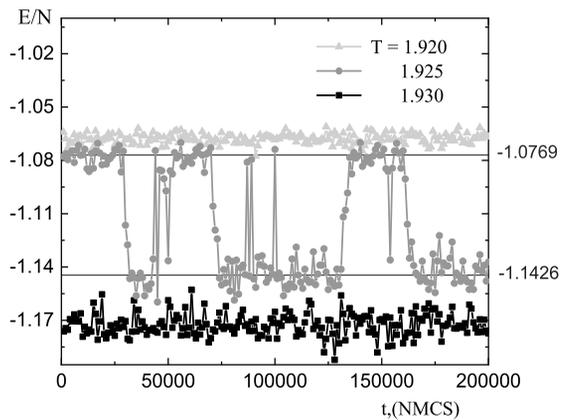


Рис. 7. Временная динамика изменения внутренней энергии при различных температурах для  $J_2 = -1$  при  $L = 64$

туации около этих двух энергетических состояний. Энергия  $E_1$  соответствует первому максимуму на гистограмме распределения энергии, а  $E_2$  — второму максимуму (рис. 6). Такое поведение временной динамики изменения внутренней энергии подтверждает наличие ФП первого рода.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследовано влияние конкуренции обменных взаимодействий на фазовые переходы и термодинамические свойства трехмерной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  на объемно-центрированной кубической решетке с использованием репличного алгоритма и алгоритма Ванга-Ландау метода Монте-Карло. На основе

гистограммного метода проведен анализ характера фазовых переходов. Установлено, что в исследуемой модели при взаимодействии ближайших соседей наблюдается фазовый переход второго рода. Учет взаимодействия вторых ближайших соседей приводит к фазовому переходу первого рода.

**Финансирование.** Исследование выполнено при поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук (№ МК-5223.2022.1.2).

## ЛИТЕРАТУРА

1. F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
2. R. J. Baxter, J. Phys. C **6**, 445 (1973).
3. C. Yamaguchi and Y. Okabe, J. Phys. A **34**, 8781 (2001).
4. R. Tamura, S. Tanaka, and N. Kawashima, Prog. Theor. Phys. **124**, 381 (2010).
5. T. Surungan, Y. Komura, and Y. Okabe, AIP Conference Proceedings **1617**, 79 (2014).
6. W. Zhang and Y. Deng, Phys. Rev. E **78**, 031103 (2008).
7. H. T. Diep, *Frustrated Spin Systems*, World Scientific Publishing, Singapore (2004).
8. I. Puha and H. T. Diep, J. Appl. Phys. **87**, 5905 (2000).
9. Zh. Fu, W. Guo, and H. W. J. Blöte, Phys. Rev. E **101**, 012118 (2020).
10. M. K. Ramazanov, A. K. Murtazaev, and M. A. Magomedov, Physica A **521**, 543 (2019).
11. Ф. А. Кассан-Оглы, А. И. Прошкин, ФТТ **60**, 1078 (2018).
12. Y. Panov and O. Rojas, Phys. Rev. E **103**, 062107 (2021).
13. Д. Р. Курбанова, А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. А. Магомедов, Т. А. Тааев, ЖЭТФ **158**, 1095 (2020).
14. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Мазагаева, М. А. Магомедов, ЖЭТФ **156**, 502 (2019).
15. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, М. А. Магомедов, М. К. Мазагаева, Письма в ЖЭТФ **114**, 762 (2021).
16. Д. Р. Курбанова, А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. А. Магомедов, Письма в ЖЭТФ **115**, 505 (2022).
17. M. Nauenberg, D. J. Scalapino, Phys. Rev. Lett. **44**, 837 (1980).
18. J. L. Cardy, M. Nauenberg, and D. J. Scalapino, Phys. Rev. B **22**, 2560 (1980).
19. A. K. Murtazaev, M. K. Ramazanov, D. R. Kurbanova, M. A. Magomedov, and K. Sh. Murtazaev, Mat. Lett. **236**, 669 (2019).
20. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. А. Магомедов, Д. Р. Курбанова, ФТТ **60**, 1798 (2018).
21. А. К. Муртазаев, Д. Р. Курбанова, and М. К. Ramazanov, Physica A **545**, 123548 (2020).
22. D. P. Landau and K. Binder, *Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press, Cambridge (2000).
23. А. О. Сорокин, Письма в ЖЭТФ **109**, 423 (2019).
24. А. О. Сорокин, Письма в ЖЭТФ **111**, 34 (2020).
25. A. Mitsutake, Y. Sugita, and Y. Okamoto, Biopolymers (Peptide Science) **60**, 96 (2001).
26. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).
27. C. Zhou and R. N. Bhatt, Phys. Rev. E **72**, 025701 (2005).
28. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. Lett. **86**, 2050 (2001).
29. Y. Komura and Y. Okabe, Phys. Rev. E **85**, 010102 (2012).

# НАРУШЕНИЕ КИРАЛЬНОЙ СИММЕТРИИ И НЕОДНОРОДНЫЕ СОСТОЯНИЯ В ДЕФОРМИРОВАННЫХ ФЕРРОМАГНЕТИКАХ

А. А. Фраерман\*

*Институт физики микроструктур Российской академии наук  
607680, Нижний Новгород, Россия*

Поступила в редакцию 11 января 2023 г.,  
после переработки 16 февраля 2023 г.  
Принята к публикации 17 февраля 2023 г.

Найден общий вид киральных слагаемых, обусловленных деформацией ферромагнетика. Для ферромагнитного стержня, подвергнутого упругой деформации кручения, показана возможность перехода от спирального состояния к вихревому. В случае одиночной винтовой дислокации указано на формирование скирмионного состояния за счет упругих деформаций и спирального распределения намагниченности, индуцируемого деформациями в ядре дислокации. Определены условия, при которых происходит переход от одного кирального распределения намагниченности к другому в ансамбле одинаковых дислокаций.

DOI: 10.31857/S0044451023060081

EDN: DFLDFE

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Фундаментальной причиной нарушения киральной магнитной симметрии является взаимодействие Дзялошинского–Мория, которое существует в системах без центра инверсии [1, 2]. Если это взаимодействие достаточно сильно, то основное состояние системы представляет собой неоднородное распределение намагниченности в виде спиралей, вихрей или магнитных скирмионов [3–7]. Такая ситуация реализуется, например, в кристаллах MnSi [8, 9] или в искусственных многослойных структурах ферромагнетик/“тяжелый” металл [10–12]. Отметим, что интерес к киральным магнитным состояниям в последние годы существенно возрос. Это связано, по крайней мере, с двумя обстоятельствами. Во-первых, большой интерес представляют магнитные скирмионы, которые могут использоваться в качестве носителей информации в новых устройствах сверхплотной памяти [13]. Во-вторых, с киральными магнитными распределениями может быть связан электрический заряд и, таким образом, в этих системах возможно наблюдение магнитоэлектрического эффекта [14, 15].

Известно, что изменение симметрии кристаллической структуры ферромагнетика происходит при его механической деформации, что может приводить к нарушению киральной магнитной симметрии. В работе [16] показано, что упругие деформации кручения нарушают симметрию “левых” и “правых” магнитных спиралей в кристалле гольмия. В работе [17] авторы исследовали вопрос о влиянии упругих деформаций, создаваемых винтовой дислокацией, на киральность магнитных вихрей в ферромагнитном диске. Вопрос о влиянии деформаций важен также для понимания роли дефектов в формировании магнитных свойств ферромагнетиков [18–20]. В работах [21–24] теоретически и экспериментально исследовано влияние деформации на распределение намагниченности в киральных магнетиках. В отличие от этих работ мы предполагаем, что без деформаций система обладает центром симметрии и взаимодействие Дзялошинского–Мория запрещено. Мы найдем общий вид киральных слагаемых, обусловленных деформацией ферромагнетика, что позволит предсказать существование новых вихреподобных и спиральных состояний в таких системах.

Статья построена следующим образом. В разд. 2 изложена феноменологическая теория магнитных киральных эффектов в деформированных ферромагнетиках. В разд. 3 рассмотрены киральные магнитные состояния в ферромагнитном стержне с деформацией кручения. Показано, что в зависимо-

\* E-mail: andr@ipmras.ru

сти от величины деформации в стержне возможны либо спиральное, либо вихревое распределение намагниченности. В разд. 4 найдены распределения намагниченности, индуцированные винтовыми дислокациями. Показано, что существуют различные вклады в магнитную киральность, обусловленные как упругими деформациями, так и деформациями в ядре дислокаций. В Заключении обсуждаются возможный микроскопический механизм деформационно-индуцированного взаимодействия Дзялошинского–Мория и основные результаты работы.

## 2. ДЕФОРМАЦИОННО-ИНДУЦИРОВАННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДЗЯЛОШИНСКОГО–МОРИЯ: ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКОЕ РАССМОТРЕНИЕ

Итак, задача состоит в определении плотности энергии ферромагнетика, которая ответственна за нарушение киральной симметрии, в присутствии деформаций. Запишем эту часть энергии в виде

$$\varepsilon = S_{ijk} M_i \frac{\partial M_k}{\partial x_j}, \quad (1)$$

где  $M_i$  — компоненты вектора магнитного момента,  $S_{ijk}$  — тензор третьего ранга, связь которого с деформациями требуется найти. Выделяя симметричную и антисимметричную части этого тензора по первым двум индексам, получим

$$\varepsilon = \frac{1}{4} (S_{ikj} + S_{kij}) \left( M_i \frac{\partial M_k}{\partial x_j} + M_k \frac{\partial M_i}{\partial x_j} \right) + \frac{1}{4} (S_{ikj} - S_{kij}) \left( M_i \frac{\partial M_k}{\partial x_j} - M_k \frac{\partial M_i}{\partial x_j} \right). \quad (2)$$

Первое, симметричное слагаемое пропорционально пространственной производной от произведения компонент магнитного момента и сводится к поправкам к магнитоупругой энергии кристалла, которые не влияют на киральность магнитного распределения. Таким образом, задача состоит в определении связи антисимметричного тензора  $D_{ikj} = S_{ikj} - S_{kij}$  с деформациями. Поскольку деформации описываются вектором смещений  $u_i$ , искомым тензор имеет вид

$$D_{ikj} = \frac{1}{2} D_1 \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_k} - \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right),$$

где  $D_1$  — константа. Таким образом, тензор, ответственный за киральное взаимодействие, есть производная от тензора дисторсии

$$d_{ik} = \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_k} - \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right).$$

Антисимметричный тензор дисторсии может быть записан в виде  $d_{ik} = e_{ikl} A_l$ , где  $e_{ikl}$  — тензор Леви-Чивита,  $A_l = (\text{rot } \mathbf{u})_l$  есть аксиальный вектор. В итоге плотность энергии принимает вид

$$\varepsilon = D_1 \frac{\partial A_l}{\partial x_j} \left[ \mathbf{M} \times \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial x_j} \right]_l. \quad (3)$$

Отметим, что эта формула совпадает с выражением, записанным в [16], в приближении медленно пространственного изменения намагниченности и деформаций. Мы покажем, что такое взаимодействие не только снимает киральное вырождение [16], но и стабилизирует в ферромагнетике неоднородные магнитные состояния.

Если в образце есть дислокации, то возможен дополнительный вклад в тензор  $D_{ikj}$ , обусловленный неоднозначностью поля смещений в ядре дислокации. Действительно, при обходе по контуру, охватывающему линию дислокации, вектор смещения получает дополнительное приращение  $\mathbf{b}$ ,

$$\oint_L du_i = \oint_L \frac{\partial u_i}{\partial x_k} dx_k = -b_i.$$

Этот вектор получил название вектора Бюргера [25]. Направление обхода контура выбрано так, что образует “правый” винт с вектором касательной к линии дислокации. Пользуясь теоремой Стокса, перейдем от интегрирования по контуру к интегрированию по поверхности, опирающейся на этот контур:

$$\oint_L \frac{\partial u_i}{\partial x_k} dx_k = \iint_{S_L} e_{jlk} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_l \partial x_k} dS_j,$$

где нормаль к поверхности параллельна касательной к линии дислокации  $dS_j = e_{j pq} dx_p dx_q$ . В итоге имеем

$$\iint_{S_L} \left( \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_p \partial x_q} - \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_q \partial x_p} \right) dx_p dx_q = b_i. \quad (4)$$

Антисимметричный тензор третьего ранга, стоящий под знаком интеграла,

$$T_{pqi} = -T_{qpi} = \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_p \partial x_q} - \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_q \partial x_p},$$

носит название тензора кручения и представляет собой поверхностную плотность вектора Бюргерса [26]. В простейшем случае одиночной винтовой дислокации, вектор Бюргерса которой направлен вдоль оси  $z$ , тензор кручения равен

$$T_{xyz} = -T_{yxz} = b\delta(x)\delta(y).$$

Для краевой дислокации, вектор Бюргерса которой направлен вдоль оси  $x$ , имеем

$$T_{xyx} = -T_{yxx} = b\delta(x)\delta(y).$$

Итак, “киральные” вклад в энергию ферромагнетика, обусловленный деформациями, записывается в виде

$$\begin{aligned} \varepsilon = D_1 \frac{\partial A_l}{\partial x_j} \left[ \mathbf{M} \times \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial x_j} \right]_l + \\ + D_2 T_{ikj} \left( M_i \frac{\partial M_k}{\partial x_j} - M_k \frac{\partial M_i}{\partial x_j} \right), \end{aligned} \quad (5)$$

где  $D_2$  — константа. Далее мы рассмотрим некоторые следствия, к которым приводят найденные киральные слагаемые.

### 3. КИРАЛЬНЫЕ МАГНИТНЫЕ СОСТОЯНИЯ В ФЕРРОМАГНИТНОМ СТЕРЖНЕ С КРУЧЕНИЕМ

Рассмотрим неоднородное основное состояние в ферромагнитном стержне, подвергнутом деформации кручения. В этом случае компоненты вектора смещений равны  $\mathbf{u} = (-\tau zy, \tau zx, 0)$ , где  $\tau = \alpha/L$ ,  $\alpha$ ,  $L$  — угол кручения и длина стержня соответственно, ось  $z$  выбрана вдоль оси стержня [25]. Предполагается, что стержень имеет круглое сечение радиуса  $R$ , деформации малы,  $\tau R \ll 1$ , и дислокации отсутствуют. Подставляя эти компоненты вектора смещений в формулу (3), получаем

$$\varepsilon = D_1 \tau (\mathbf{M} \cdot \text{rot}_\perp \mathbf{M}) - 2D_1 \tau (\mathbf{M} \cdot \text{rot}_\parallel \mathbf{M}), \quad (6)$$

где

$$\begin{aligned} (\text{rot}_\perp \mathbf{M})_i = e_{ikx} \frac{\partial}{\partial x} M_k + e_{iky} \frac{\partial}{\partial y} M_k, \\ (\text{rot}_\parallel \mathbf{M})_i = e_{ikz} \frac{\partial}{\partial z} M_k. \end{aligned}$$

Индексы у дифференциального оператора  $\text{rot}$  указывают, что он действует на функции, зависящие либо от поперечных ( $\perp$ ), либо от продольных ( $\parallel$ ) координат. Если предположить, что магнитный момент зависит только от продольной координаты  $z$ ,

то кручение стержня может индуцировать в нем распределение намагниченности в виде магнитной спирали, ось которой совпадает с осью стержня. При этом возникают размагничивающие поля, которые повышают энергию системы. Характеризуя направление магнитного момента полярным  $\theta$  и азимутальным  $\varphi$  углами

$$\mathbf{M} = M_0 (\sin \theta \cos \varphi \mathbf{e}_x + \sin \theta \sin \varphi \mathbf{e}_y + \cos \theta \mathbf{e}_z),$$

где  $\mathbf{e}_i$  — орты декартовой системы координат, для полной энергии с учетом обменного слагаемого и энергии размагничивающих полей в цилиндре (последнее слагаемое в фигурных скобках) получим

$$\begin{aligned} E = M_0^2 S \int_0^L \left\{ \frac{l^2}{2} \left( \left( \frac{\partial \theta}{\partial z} \right)^2 + \sin^2 \theta \left( \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)^2 \right) + \right. \\ \left. + 2D_1 \tau \sin^2 \theta \frac{\partial \varphi}{\partial z} + \pi \sin^2 \theta \right\} dz, \end{aligned} \quad (7)$$

где  $l^2$  — обменная константа,  $S$  — площадь образца. Предполагается, что углы  $\theta$  и  $\varphi$  зависят только от продольной координаты  $z$ . Принятое приближение для вычисления магнитостатической энергии справедливо при условии, что масштаб магнитной неоднородности много больше радиуса стержня. Однако более точный расчет размагничивающих полей лишь уменьшит магнитостатическую энергию и облегчит условия для образования магнитной спирали. Вариация функционала (7) по азимутальному углу приводит к уравнению

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( \sin^2 \theta \left( l^2 \frac{\partial \varphi}{\partial z} + 2D_1 \tau \right) \right) = 0. \quad (8)$$

Приравнявая нулю выражение в скобках, находим волновое число спирали

$$\frac{\partial \varphi}{\partial z} = q = -\frac{2D_1 \tau}{l^2}. \quad (9)$$

Подставляя найденное решение в выражение для энергии (7), получаем, что магнитные свойства системы определяются эффективной магнитной анизотропией:

$$E_a = \left( \pi - \frac{1}{2} q^2 l^2 \right) \sin^2 \theta. \quad (10)$$

Физический смысл этой энергии состоит в конкуренции энергетического выигрыша при образовании спирали за счет взаимодействия Дзялошинского–Мория и проигрыша из-за магнитостатической энергии размагничивающих полей. Если  $q > q_c = \sqrt{2\pi}/l$ ,

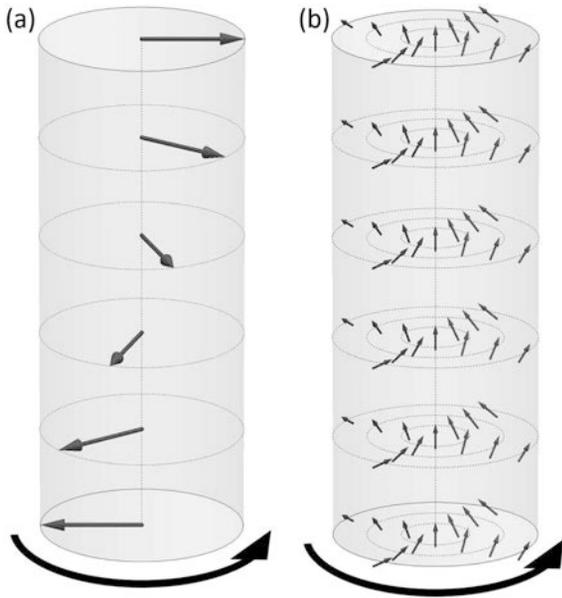


Рис. 1. а) Спиральное распределение намагниченности в ферромагнитном стержне с кручением. б) Вихревое распределение в стержне, возникающее при уменьшении кручения

то равновесное значение полярного угла  $\theta = \pi/2$  и образование магнитной спирали энергетически выгодно (рис.1 а). Если же выполняется обратное условие  $q < q_c$ , то более выгодным, по сравнению со спиральным, является однородное распределение с ориентацией намагниченности вдоль стержня. Покажем, что однородное распределение не может реализоваться из-за наличия слагаемого  $D_1\tau (\mathbf{M} \cdot \text{rot} \perp \mathbf{M})$  в киральной энергии магнетика (6) и основным состоянием в этом случае является вихревое распределение намагниченности, в котором отличны от нуля азимутальная и продольная компоненты:

$$\mathbf{M} = M_0 (\sin \theta \mathbf{e}_\varphi + \cos \theta \mathbf{e}_z),$$

$\mathbf{e}_{\varphi,z}$  — орты цилиндрической системы координат. Такое распределение не создает размагничивающих полей и энергия магнетика приобретает вид

$$E = 2\pi M_0^2 l^2 L \int_0^R x \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \theta}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{2} \frac{\sin^2 \theta}{x^2} + \frac{D_1 \tau}{l} \left( \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{1}{x} \sin \theta \cos \theta \right) \right] dx, \quad (11)$$

$x = \rho/l, R \equiv R/l$ . Соответствующая экстремуму функционала (11) функция  $\theta(x)$  удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{1}{x} \frac{\partial \theta}{\partial x} - \frac{\sin \theta \cos \theta}{x^2} +$$

$$+ \frac{D_1 \tau}{l} \frac{1}{x} (1 - \cos 2\theta) = 0 \quad (12)$$

с условием на границе стержня  $x = R$

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{D_1 \tau}{l} = 0. \quad (13)$$

Заметим, что однородные решения  $\theta = 0, \pi$  не удовлетворяют этому граничному условию. Для нахождения неоднородного решения предположим, что намагниченность мало отклоняется от оси стержня. Тогда уравнение (12) можно линеаризовать, например, при малых  $\theta$ . Общее решение линеаризованного уравнения имеет вид

$$\theta(x) = C_1 x + C_2 \frac{1}{x}. \quad (14)$$

Из требования конечности решения при  $x \rightarrow 0$  константа  $C_2 = 0$ . Для определения константы  $C_1$  воспользуемся граничным условием (13) и окончательно находим

$$\theta(\rho) = -\frac{D_1 \tau \rho}{l^2}. \quad (15)$$

Действительно, отклонения намагниченности от оси стержня малы в силу выполнения условий  $\tau R \ll 1$ . Таким образом, при малых значениях константы  $D_1$ ,

$$\frac{D_1 \tau}{l} < \sqrt{\pi/2},$$

основным состоянием стержня является “макроскопический” вихрь. Энергия этого состояния отрицательна, т.е. меньше энергии однородного состояния и равна

$$E = -M_0^2 V \left( \frac{D_1 \tau}{l} \right)^2,$$

где  $V$  — объем стержня (рис.1 б). Киральность вихревого распределения намагниченности определяется знаком взаимодействия  $D_1$ , направлением кручения  $\tau$  и ориентацией намагниченности в центре стержня. Отклонения (15) малы, но могут быть увеличены путем приложения внешнего магнитного поля, ориентированного против направления намагниченности в коре вихря. При приложении внешнего магнитного поля в энергии ферромагнетика следует учесть зеемановское слагаемое, которое имеет вид

$$E = -2\pi M_0 l^2 L H \int_0^R x \cos \theta dx. \quad (16)$$

Линеаризованное уравнение Эйлера–Лагранжа

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{1}{x} \frac{\partial \theta}{\partial x} - \frac{\theta}{x^2} - \frac{H}{M_0} \theta = 0 \quad (17)$$

при выбранном направлении магнитного поля приобретает вид уравнения Бесселя, а его решение, конечное при  $x \rightarrow 0$  и равное

$$\theta = C_1 J_1 \left( x \sqrt{\frac{M_0}{|H|}} \right),$$

есть функция Бесселя первого порядка. Используя граничное условие (13) и учитывая условие малости отклонения намагниченности от оси стержня, находим

$$\theta(\rho) = -\frac{D_1 \tau \rho}{l^2} \left( 1 + \frac{\rho^2}{4l^2} \frac{|H|}{M_0} \right). \quad (18)$$

#### 4. МАГНИТНЫЕ СОСТОЯНИЯ, ИНДУЦИРОВАННЫЕ ВИНТОВЫМИ ДИСЛОКАЦИЯМИ

Рассмотрим магнитные состояния, индуцируемые в ферромагнетике одиночной винтовой дислокацией. Следует различать область ядра дислокации  $\rho < r$ , размер  $r$  которой составляет несколько межатомных расстояний, и область  $\rho > r$ , в которой деформации можно считать упругими. Для определения киральной энергии вне ядра дислокации воспользуемся известным выражением для упругих смещений, индуцированных винтовой дислокацией [25], вектор Бюргера которой ориентирован вдоль оси  $z$ ,  $\mathbf{u} = (0, 0, b\varphi/2\pi)$ ,  $\varphi$  — азимутальный угол цилиндрической системы координат. Подставляя это решение в (6), находим вид киральной магнитной энергии, обусловленной упругими деформациями:

$$\varepsilon = \frac{D_1 b}{2\pi \rho^2} \left( M_z \frac{\partial M_\varphi}{\partial \rho} - M_\varphi \frac{\partial M_z}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho} M_z M_\varphi \right). \quad (19)$$

Вновь полагая, что  $\mathbf{M} = M_0 (\sin \theta \mathbf{e}_\varphi + \cos \theta \mathbf{e}_z)$ , имеем

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{1}{x} \frac{\partial \theta}{\partial x} - \frac{\sin \theta \cos \theta}{x^2} - \frac{D_1 b}{2\pi l^3} \frac{1}{x^2} (1 - \cos 2\theta) = 0, \quad (20)$$

с условием на границе ядра дислокации  $x = r$

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{D_1 b}{2\pi l^3 r^2} = 0. \quad (21)$$

Общее решение линеаризованного уравнения (20) совпадает с решением (14). Из требования конечности  $\theta$  при  $x \rightarrow \infty$  следует, что  $C_1 = 0$ . Для определения константы  $C_2$  воспользуемся граничным условием (21) и окончательно находим

$$\theta(\rho) = \frac{D_1 b}{2\pi l^2 \rho}. \quad (22)$$

Энергия этого состояния отрицательна и равна

$$E = -\frac{1}{4\pi} M_0^2 L \left( \frac{D_1 b}{lr} \right)^2. \quad (23)$$

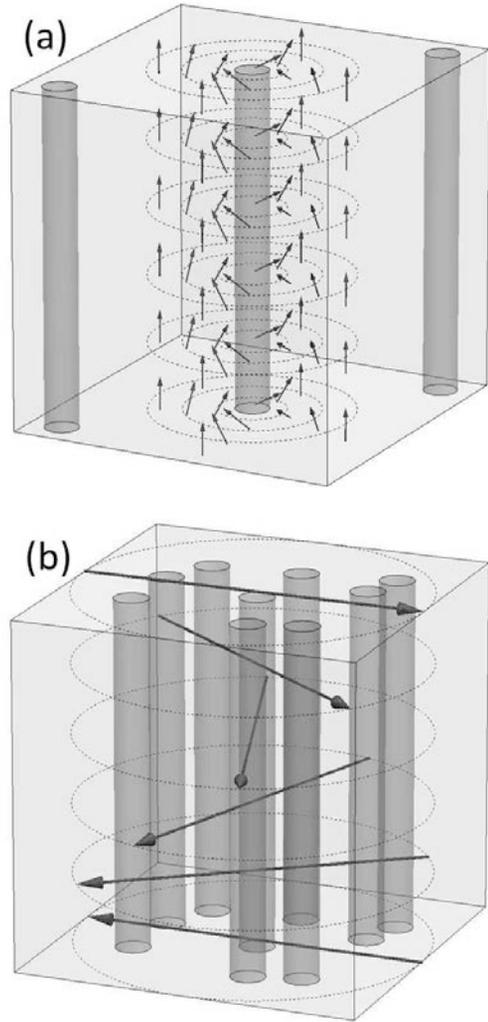


Рис. 2. а) Скирмионное распределение намагниченности, индуцированное упругими деформациями вне ядра дислокации. б) Спиральное распределение в системе из  $N$  винтовых дислокаций

Это решение представляет собой часть магнитного скирмиона, с асимптотическим поведением  $\theta \rightarrow 0$  при  $x \rightarrow \infty$  (рис.2 а). Для винтовой дислокации есть и другой вклад, обусловленный тензором кручения (5). Если вектор Бюргера имеет только  $z$ -компоненту, плотность энергии, связанная с тензором кручения, приобретает вид

$$\varepsilon = D_2 \delta(x) \delta(y) \left( M_x \frac{\partial M_y}{\partial z} - M_y \frac{\partial M_x}{\partial z} \right). \quad (24)$$

Этот вклад локализован в ядре дислокации. Предположим, что дислокационный вклад индуцирует спиральное распределение намагниченности

$$\mathbf{M} = M_0 (\mathbf{e}_x \cos qz + \mathbf{e}_y \sin qz).$$

Тогда энергия спирали как функция ее волнового числа  $q$  есть

$$E = M_0^2 V \left( \frac{1}{2} l^2 q^2 + \frac{1}{S} D_2 q \right), \quad (25)$$

где  $S$  — площадь образца. Волновое число и энергия спирали, соответствующие минимуму (25), равны

$$q_c = -\frac{D_2}{l^2 S},$$

$$E_{sp} = -\frac{1}{2} M_0^2 \frac{L_z D_2^2}{S l^2}.$$

При увеличении площади образца выигрыш энергии при образовании спирали стремится к нулю и более выгодным является образование скирмионного распределения намагниченности. Однако ситуация изменяется при переходе от изолированной дислокации к системе, состоящей из  $N$  дислокаций. Энергия такого распределения равна

$$E = M_0^2 V \left( \frac{1}{2} l^2 q^2 + N D_2 q \right). \quad (26)$$

Волновое число спирали линейно растет с увеличением плотности:

$$q_c = -\frac{D_2 N}{l^2},$$

а энергия этого состояния

$$E_{sp} = -\frac{1}{2} M_0^2 V N^2 \frac{D_2^2}{l^2}.$$

При этом энергия скирмионного распределения увеличивается по модулю линейно с ростом концентрации дислокаций:

$$E_{sc} = -\frac{1}{4\pi} M_0^2 L \left( \frac{D_1 b}{lr} \right) N.$$

Более того, этот рост замедляется из-за эффективного “отталкивания” скирмионов, порожденных различными дислокациями. Для оценки величины этого эффекта рассмотрим распределение намагниченности от двух винтовых дислокаций, расположенных на расстоянии  $\rho_0$ . В линейном приближении это распределение есть суперпозиция распределений, порождаемых каждой из дислокаций  $\theta = \theta_1 + \theta_2$ . Можно записать

$$\theta = \frac{D_1 b}{2\pi l^2} \left( \frac{1}{\rho} + \frac{1}{|\rho - \rho_0|} \right). \quad (27)$$

Подстановка этого решения в выражение для обменной энергии даст перекрестное слагаемое

$$\begin{aligned} \varepsilon_{int} &= l^2 M_0^2 \int \frac{\partial \theta_1}{\partial x_i} \frac{\partial \theta_2}{\partial x_i} dV = \\ &= l^2 M_0^2 \oint \frac{\partial \theta_1}{\partial x_i} \theta_2 dS_i. \end{aligned} \quad (28)$$

При выводе этой формулы мы воспользовались теоремой Стокса и учли, что в рассматриваемом приближении  $\Delta \theta_1 = 0$ . Таким образом, вычисление энергии этого взаимодействия сводится к вычислению интеграла по поверхности, ограничивающей ядро дислокации. Физически повышение энергии связано с эффективным “отталкиванием” магнитных вихрей с одинаковой киральностью. Предполагая, что расстояние между дислокациями много больше координаты дислокации,  $\rho_0 \gg r$ , получаем

$$\varepsilon_{int} = M_0^2 L \left( \frac{D_1 b}{2\pi l} \right)^2 \frac{1}{r \rho_0},$$

а энергию взаимодействия  $N$  дислокаций можно оценить по формуле

$$\varepsilon_{int} \approx M_0^2 V \left( \frac{D_1 b}{2\pi l} \right)^2 \frac{1}{r} N^{3/2}.$$

Таким образом, энергия скирмионов станет положительной при  $N \approx 1/r^2$ . Это очень высокая плотность дислокаций, так как размер ядра дислокации порядка межатомного расстояния, что позволяет пренебречь эффектом “отталкивания” при расчете критической концентрации дислокации. Не учитывая эффекта взаимодействия скирмионов, оценим критическую плотность дислокаций  $N_c$ , при которой происходит переход от скирмионного распределения к спиральному. Приравнявая  $E_{sc} = E_{sp}$ , находим

$$N_c = \frac{1}{2\pi} \left( \frac{D_1 b}{D_2 r} \right)^2.$$

Итак, при малой плотности дислокаций реализуется скирмионное распределение, в котором каждый “скирмион” закреплен на дислокации. При  $N > N_c$  основным состоянием системы становится “когерентное” спиральное состояние (рис. 2). Принимая во внимание, что  $r \sim b$ , мы видим, что критическая концентрация определяется соотношением констант взаимодействия Дзялошинского–Мория, обусловленных упругими ( $D_1$ ) и пластическими ( $D_2$ ) деформациями.

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основным результатом работы является определение условий, при которых деформации ферромагнетика индуцируют в нем “антисимметричный” обмен Дзялошинского–Мория (формула (5)). Наличие такого взаимодействия приводит к снятию кирального вырождения в ферромагнетике и формированию неоднородных киральных состояний. Показано, что существует две возможности управления магнитной киральностью с помощью деформаций. Во-первых, это возможно, если деформации характеризуются ротором поля смещений. Такого сорта смещения возникают, например, при упругой деформации ферромагнетика под действием кручения. Во-вторых, деформации в ядре дислокации также являются источником “антисимметричного” обмена. Важно, что вне ядра дислокации создают сдвиговое поле смещений, которые порождают неоднородные магнитные структуры иной симметрии. В работе найдены условия, при которых реализуется либо спиральное, либо вихреподобное распределение намагниченности. Таким образом, мы указываем на дополнительную возможность создания новых магнитных состояний с помощью деформаций. Так, формирование “макроскопического” вихря в ферромагнитном стержне, подвергнутом деформации кручения, представляет определенный интерес для изучения распространения электронов, фотонов или магнонов вдоль стержня. Действительно, такой вихрь характеризуется тороидным моментом  $\mathbf{T} = T\mathbf{e}_z$ , наличие которого приводит к невзаимности распространения возбуждений с волновым вектором параллельно и антипараллельно вектору тороидного момента. Кроме того, известно [27], что среды с тороидным моментом могут проявлять магнитоэлектрический эффект. Отметим также, что формирование неоднородных магнитных состояний, обусловленных антисимметричным обменом, может существенно повлиять на свойства ферромагнетиков с дефектами. Так, границы зерен в поликристаллах представляют ряд краевых дислокаций [28]. Конечно, при этом магнитная киральность в среднем по образцу не возникает, так как средний вектор Бюргера равен нулю. Однако флуктуации “антисимметричного” обмена могут приводить к специфическим неоднородным состояниям.

В заключение обсудим возможную микроскопическую природу деформационно-индуцированного антисимметричного обмена. Возможно, что за возникновение такого взаимодействия ответственно

спин-орбитальное взаимодействие. Для определения вида гамильтониана спин-орбитального взаимодействия воспользуемся методом инвариантов [29]. Тогда в низшем по волновому вектору электронов  $\mathbf{k}$  приближении для гамильтониана спин-орбитального взаимодействия имеем  $\hat{H}_{SO} = \Omega_{ij}\sigma_i k_j$ , где  $\sigma_i$  — матрицы Паули,  $\Omega_{ij}$  — псевдотензор второго ранга. В торсионно-деформированных твердых телах этот псевдотензор связан с антисимметричным тензором третьего ранга  $D_{ksj}$  (формула (5)), найденным в нашей работе,  $\Omega_{ij} = e_{iks}D_{ksj}$ . Наличие спин-орбитального взаимодействия в газе электронов проводимости приводит к особенностям его магнитной восприимчивости и возникновению антисимметричного взаимодействия двух магнитных ионов, помещенных в такой газ [30, 31].

**Финансирование.** Работа выполнена в рамках государственного задания № 0030-2021-0021.

## ЛИТЕРАТУРА

1. I.E. Dzyaloshinskii, Sov. Phys. JETP **5**, 1259 (1957).
2. T. Moriya, Phys. Rev. **120**, 91 (1960).
3. A.N. Bogdanov and D. A. Yablonskii, Sov. Phys. JETP **68**, 101 (1989).
4. A.N. Bogdanov and A. Hubert, J. Magn. Magn. Mater. **138**, 255 (1994).
5. U.K. Röbber, A.N. Bogdanov, and C. Pfleiderer, Nature **442**, 797 (2006).
6. A.N. Bogdanov and U.K. Röbber, Phys. Rev. Lett. **87**, 037203 (2001).
7. B. Binz, A. Vishwanath, and V. Aji, Phys. Rev. Lett. **96**, 207202 (2006).
8. S. Mühlbauer, B. Binz, F. Jonietz et al., Science **323**, 915 (2009).
9. A. Crepieux and C. Lacroix, J. Magn. Magn. Mater. **182**, 341 (1998).
10. S. Rohart and A. Thiaville, Phys. Rev. B **88**, 184422 (2013).
11. A. Fert, V. Cros, and J. Sampaio, Nat. Nanotechnol. **8**, 152 (2013).
12. M. Bode, Nature **447**, 190 (2007).
13. A. Fert, N. Reyren, and V. Cros, Nat. Rev. Mater. **2**, 17031 (2017).
14. В. Г. Барьяхтар, В. А. Львов, Д. А. Яблонский, Письма в ЖЭТФ **21**, 565 (1983).
15. M. Mostovoy, Phys. Rev. Lett. **96**, 067601 (2006).

16. V.I. Fedorov, A.G. Gukasov, V. Kozlov, S.V. Maleyev, V.P. Plakhty, and I.A. Zobkalo, *Phys. Lett. A* **224**, 372 (1997).
17. A.B. Butenko and U. K. Rößler, *EPJ Web of Conf.* **40**, 08006 (2013).
18. A. Arrott, *J. Appl. Phys.* **34**, 1108 (1963).
19. K.L. Metlov and A. Michels, *Phys. Rev. B* **91**, 054404 (2015).
20. K.L. Metlov, K. Suzuki, D. Honecker, and A. Michels, *Phys. Rev. B* **101**, 214410 (2020).
21. P. Schoenherr, J. Müller, L. Köhler et al., *Nature Phys.* **14**, 465 (2018).
22. M. Azhar, V. P. Kravchuk, and M. Garst, *Phys. Rev. Lett.* **128**, 157204 (2022).
23. L. Liu, W. Chen, and Y. Zheng, *Phys. Rev. Lett.* **128**, 257201 (2022).
24. N.S. Gusev, A.V. Sadovnikov, S.A. Nikitov, M.V. Sapozhnikov, and O.G. Udalov, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 157202 (2020).
25. L.D. Landau and E.M. Lifschitz, *Theory of Elasticity*, Pergamon Press (1975).
26. М.О. Катанаев, УФН **175**, 705 (2005) [M.O. Katanaev, *Phys.-Usp.* **48**, 675 (2005)].
27. N.A. Spaldin, M. Fiebig, and M. Mostovoy, *J. Phys. Cond. Matt.* **20**, 434203 (2008).
28. J.P. Hirth and J. Lothe, *Theory of Dislocations*, Reprint Edition, Krieger Pub Co (1991).
29. E.L. Ivchenko and G.E. Pikus, *Superlattices and Other Heterostructures. Symmetry and Optical Phenomena*, Springer, Berlin (1995).
30. H. Imamura, P. Bruno, and Y. Utsumi, *Phys. Rev. B* **69**, 121303 (2004).
31. S.-X. Wang, H.-R. Chang, and J. Zhou, *Phys. Rev. B* **96**, 115204 (2017).

# К ТЕОРИИ НУКЛЕАЦИИ ИОННЫХ СОЛЕЙ ИЗ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ

М.С. Вещунов\*

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук  
115191, Москва, Россия

Поступила в редакцию 13 января 2023 г.,  
после переработки 31 января 2023 г.  
Принята к публикации 31 января 2023 г.

Теория нуклеации ионных солей из водных растворов подвергается критическому анализу и дальнейшему развитию в двух предельных случаях плохо и хорошо растворимых сильных электролитов. В случае плохо растворимых солей с относительно большой длиной экранирования (по сравнению с радиусом критического зародыша) классическая теория нуклеации модифицируется с учетом влияния заряда критического зародыша на скорость нуклеации, которым пренебрегалось в более ранних моделях. В противоположном пределе хорошо растворимых солей, характеризующихся относительно малой длиной экранирования, влиянием заряда критического зародыша на скорость нуклеации можно с хорошей точностью пренебречь. Однако расхождение с более ранними моделями, связанное в основном со значением предэкспоненциального множителя, может достигать нескольких порядков.

DOI: 10.31857/S0044451023060093  
EDN: DFOHXU

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Осаждение ионных солей (сильных электролитов) из пересыщенного водного раствора заметно отличается от большинства других фазовых превращений, поскольку эти кристаллы растут преимущественно за счет присоединения ионов, а не молекул [1]. Так, при осаждении коллоидных частиц галогенида серебра ( $\text{AgI}$ ) кристаллы растут не за счет присоединения молекул иодида серебра, формирующих кристалл, а в результате присоединения ионов серебра и иода, и любая теория, описывающая зародышеобразование (нуклеацию) и рост ионных кристаллов, должна это отражать [2, 3].

При этом частицы малорастворимых неорганических соединений в водных растворах, например, частицы галогенидов серебра ( $\text{AgI}$ ,  $\text{AgCl}$  или  $\text{AgBr}$ ), взвешенные в водном растворе, содержащем галогенид в качестве основного компонента, как правило, несут электрический заряд. Частицы приобретают поверхностный заряд за счет преимущественной адсорбции или десорбции потенциал-определяющих

ионов (ПОИ). Классической коллоидной суспензией, наиболее полно исследованной экспериментально, является золь иодида серебра, для которого потенциал-определяющими ионами являются ионы  $\text{Ag}^+$  и  $\text{I}^-$  [4, 5].

Как правило, гомогенная нуклеация в водных растворах рассматривается как доминирующий механизм зародышеобразования, описываемый классической теорией нуклеации [6–8], которая с некоторыми модификациями может быть распространена и на гетерогенную нуклеацию (ср. [9, 10]). Однако эффект поверхностного заряда зародышей обычно считается несущественным (см., например, [3]) и поэтому игнорируется в существующих моделях. В настоящей статье, чтобы преодолеть это несоответствие существующих моделей применительно к малорастворимым коллоидам (таким как галогениды серебра) с относительно большой длиной экранирования (по сравнению с радиусом критического зародыша), классическая теория нуклеации будет модифицирована с учетом влияния заряда критического зародыша на скорость нуклеации.

В соответствии с общей теорией электролитов (см., например, [11]), равновесие между твердой фазой ( $s$ ), состоящей из молекул  $\text{MX}$ , и водным раствором ( $a$ ),  $\text{MX}(s) = \text{MX}(a)$ , в случае плоской и незаряженной границы раздела фаз представляется

\* E-mail: vms@ibrae.ac.ru

через химические потенциалы молекул как

$$\mu_{MX}^{(s)} = \mu_{MX}^{(eq,\infty)}, \quad (1)$$

где  $\mu_{MX}^{(s)}$  — химический потенциал молекул  $MX$  в твердой фазе,  $\mu_{MX}^{(eq,\infty)}$  — равновесный химический потенциал молекул  $MX$  в водном растворе, а локальное равновесие между молекулами и ионами в растворе,  $MX(a) = M^+(a) + X^-(a)$ , представляется как

$$\mu_{MX} = \mu_{M^+} + \mu_{X^-}, \quad (2)$$

где  $\mu_i$  обозначает химический потенциал компонент,  $i = M^+, X^-$ ,  $MX$ , в водном растворе. Для солей с очень низкой растворимостью (идеальные растворы) химический потенциал равен

$$\mu_i = \mu_i^{(0)} + kT \ln c_i, \quad (3)$$

где  $\mu_{i,0}$  и  $c_i$  — стандартный химический потенциал и концентрация частиц  $i$  в водном растворе, соответственно. Следовательно, условие равновесия (1) можно представить в виде

$$c_{MX}^{(eq,\infty)} = (1 - \alpha)C = K_s, \quad (4)$$

где

$$C = c_{MX} + \frac{1}{2}(c_{M^+} + c_{X^-})$$

— общая концентрация растворенного чистого электролита ( $c_{M^+} = c_{X^-}$ );  $\alpha$  — степень диссоциации растворенных молекул  $MX$ ;  $K_s$  — константа равновесия фаз, тогда как локальное равновесие между молекулами и ионами в растворе (в пространственной точке  $\mathbf{r}$ ) описывается соотношением

$$c_{MX}(\mathbf{r}) = K_I c_{M^+}(\mathbf{r}) c_{X^-}(\mathbf{r}) = K_I \alpha^2 C^2, \quad (5)$$

где

$$K_I = \exp \left[ \frac{\left( \mu_{M^+}^{(0)} + \mu_{X^-}^{(0)} - \mu_{MX}^{(0)} \right)}{kT} \right]$$

— константа ионной ассоциации, которую, в соответствии с уравнениями (4) и (5), можно связать с  $\alpha$  соотношением

$$K_I = \frac{(1 - \alpha)}{C \alpha^2}.$$

В случае  $\alpha \rightarrow 1$ , когда наибольшая часть растворенного вещества диссоциирует с образованием свободных ионов, электролит является сильным. Этот

случай соответствует исчезающим значениям константы равновесия фаз,  $K_s \rightarrow 0$ , и константы ионной ассоциации,  $K_I \rightarrow 0$ , в то время как их отношение сохраняет конечное значение, определяемое как произведение растворимости

$$K_c = \frac{K_s}{K_I}.$$

Поэтому насыщенный раствор (находящийся в равновесии с твердой фазой) описывается соотношением

$$c_{M^+}^{(eq,\infty)} c_{X^-}^{(eq,\infty)} = c^{*2} = K_c = K_I^{-1} c_{MX}^{(eq,\infty)}, \quad (6)$$

где  $c^* = K_c^{-1/2}$  — растворимость. В случае твердо-сферического выделения конечного радиуса  $R$  с незаряженной поверхностью условие равновесия на границе раздела описывается уравнением Гиббса-Кельвина

$$\begin{aligned} \mu_{MX}^{(eq,R)} &= \mu_{MX}^{(eq,\infty)} + \frac{2\gamma\Omega}{R} = \\ &= \mu_{MX}^{(0)} + kT \ln c_{MX}^{(eq,\infty)} + \frac{2\gamma\Omega}{R}, \end{aligned} \quad (7)$$

где  $\Omega$  — объем молекулы  $MX$ , или

$$c_{MX}^{(eq,R)} = c_{MX}^{(eq,\infty)} \exp \left( \frac{2\gamma\Omega}{kTR} \right), \quad (8)$$

и, таким образом, из уравнений (5) и (6) следует

$$c_{M^+}(R) c_{X^-}(R) = K_I^{-1} c_{MX}^{(eq,R)} = c^{*2} \exp \left( \frac{2\gamma\Omega}{kTR} \right), \quad (9)$$

где  $c_{M^+}(R)$  и  $c_{X^-}(R)$  — концентрации растворенных ионов вблизи границы раздела фаз (т.е. на радиальном расстоянии от центра частицы  $r = R$ ).

Для частицы с зарядом на поверхности химический потенциал растворенных ионов на расстоянии  $r \rightarrow \infty$  от частицы принимает вид ([4, 5])

$$\mu_i = \mu_i^{(0)} + kT \ln c_i + q_i \Delta\phi(\infty), \quad (10)$$

где  $q_i = \pm ze$  — заряд ионов  $i = M^+, X^-$  в растворе (для  $\text{AgI}$ ,  $z = 1$ , как будет предполагаться в дальнейшем),

$$\Delta\phi(\infty) = \frac{Q}{\varepsilon R}$$

— разность электрических потенциалов между твердой фазой и жидкостью (на расстоянии  $r \rightarrow \infty$  от поверхности),  $Q$  — поверхностный заряд,  $\varepsilon \approx 80$  (при 298 К [11]) — диэлектрическая проницаемость жидкости.

Поверхностный заряд определяется через поверхностную концентрацию адсорбированных ПОИ ( $M^+$  и  $X^-$ ) как (см., например, [5])

$$Q = 4\pi R^2 \Gamma_{max} q_i \sum_{i=+,-} \theta_i, \quad (11)$$

где  $\theta_i = \Gamma_i / \Gamma_{max}$  — степень покрытия поверхности адсорбированными ионами,  $\Gamma_i$  — поверхностная концентрация адсорбированных ионов (и  $\Gamma_{max}$  — ее значение при полном покрытии).

Степень покрытия поверхности адсорбированными ионами  $\theta_i$  можно рассчитать из условия равновесия между адсорбированными и растворенными ионами вблизи поверхности частицы,  $M^+(ad) = M^+(a)$  и  $X^-(ad) = X^-(a)$  (см., например, [2]), представленного в виде

$$\mu_i^{(ad)} = \mu_i(R), \quad (12)$$

где  $\mu_i^{(ad)}$  — химический потенциал адсорбированных ионов, рассчитываемый как (см., например, [5])

$$\mu_i^{(ad)} = \mu_i^{(ad,0)} + kT \ln \left[ \frac{\theta_i}{(1 - \theta_+ - \theta_-)} \right], \quad (13)$$

а  $\mu_i(R)$  — химический потенциал растворенных ионов вблизи поверхности частицы (радиуса  $R \gg 1$  нм, как предполагается ниже), рассчитываемый как

$$\mu_i(R) = \mu_i^{(0)} + kT \ln c_i(R). \quad (14)$$

При подстановке (13) и (14) в (12) условие равновесия на поверхности частицы принимает вид изотермы Ленгмюра

$$\frac{\theta_i}{(1 - \theta_+ - \theta_-)} = K_L^{(i)} c_i(R), \quad (15)$$

где

$$K_L^{(i)} = \exp \left( \left[ \frac{\mu_i^{(0)} - \mu_i^{(ad,0)}}{kT} \right] \right),$$

а при относительно небольшом покрытии поверхности,  $\theta_i \ll 1$  (что будет подтверждено дальнейшим анализом экспериментов, представленным в разд. 2.2), принимает вид закона Генри

$$\theta_i \approx K_L^{(i)} c_i(R). \quad (16)$$

При выводе уравнений (14)–(16) неявно предполагалось, что влияние электростатического потенциала на процессы адсорбции/десорбции пренебрежимо мало. Действительно, полагая, что поверхностные кинетические процессы происходят в пограничном

слое толщиной  $d$ , сравнимой со средним межмолекулярным расстоянием в жидкости,  $d \leq 1$  нм  $\ll R$  (на внешней поверхности которого,  $r \approx R + d \approx R$ , определяются граничные концентрации ионов  $c_i(R)$ ), падением электростатического потенциала в этом слое  $\Delta\phi_s$  можно пренебречь, если  $|ze\Delta\phi_s| \ll kT |\ln c_i(R)|$ . Учитывая, что  $c_i(R) \ll 1$ , это требование консервативно выполняется при условии  $\frac{4\pi|\sigma|ed}{\epsilon kT} \leq 1$ , или  $|\sigma| \leq \frac{\epsilon kT}{4\pi ed} \approx 20$  мкКл/см<sup>2</sup> (для  $z = 1$ ), что и будет предполагаться в дальнейшем.

Экранирование поверхностного заряда в (рассматриваемом) чистом электролите МХ осуществляется либо растворенными ионами  $M^+$ ,  $X^-$ , либо продуктами диссоциации молекул воды  $H^+$  и  $OH^-$ , при этом длина экранирования характеризуется радиусом Дебая,

$$R_D \approx \left( \frac{\epsilon kT}{4\pi \sum_i c_i e^2} \right)^{1/2}.$$

В случае AgI с  $K_c^{1/2} \approx 10^{-8}$  М (моль/дм<sup>3</sup>) экранирование заряда частиц осуществляется в основном ионами  $H^+$  и  $OH^-$  ( $K_c^{1/2} \approx 10^{-7}$  М), так как их концентрация на порядок превышает концентрацию ионов электролита. В этом случае  $R_D \approx 1$  мкм, и для коллоидных частиц радиусом  $R \ll R_D \approx 1$  мкм эффектом экранирования электростатического потенциала частицы можно с хорошей точностью пренебречь.

Как показано ниже, критический радиус ядра для сильных бинарных электролитов ( $c_{Ag^+} = c_{I^-} = c_0$ ) равен

$$R^* = \frac{2\gamma\Omega}{kT \ln(S^2)} = \frac{\gamma\Omega}{kT \ln S},$$

где  $\Omega \approx 7 \cdot 10^{-29}$  м<sup>3</sup> — молекулярный объем AgI,  $\gamma \approx 0.1$  Дж/м<sup>2</sup> — поверхностное натяжение частиц [12],  $T \approx 300$  К — характерная температура эксперимента [10],  $S = c_0/c^*$  — степень пересыщения,  $c^*$  — растворимость (определяется уравнением (6)). Следовательно, для применимости классической теории нуклеации (см. ниже), предполагающей  $n^* = 4\pi R^{*3}/3\Omega \gg 1$ , или  $R^* \gg 0.25$  нм, где  $n^*$  — число молекул в критическом зародыше, следует рассматривать относительно малые значения степени пересыщения

$$\ln S \ll \left( \frac{4\pi}{3} \right)^{1/3} \frac{\gamma\Omega^{2/3}}{kT} \approx 7,$$

или  $S \ll 10^3$ . Это позволяет пренебречь эффектом экранирования в широком диапазоне критических

размеров зародышей  $0.25 \text{ нм} \ll R^* \ll R_D \approx 1 \text{ мкм}$ , т.е.  $2 \cdot 10^{-3} \ll \ln S \ll 7$  или  $2 \cdot 10^{-3} \ll \delta \ll 10^3$  (где  $\delta \equiv S - 1$  — относительный коэффициент пересыщения), что хорошо соответствует экспериментальным условиям (см. [10]).

## 2. МАЛОРАСТВОРИМЫЕ СОЛИ

### 2.1. Ионный транспорт и заряд коллоидных частиц

В случае малорастворимых сильных электролитов с  $R \ll R_D$  уравнение диффузии для ионов, мигрирующих в неэкранированном электростатическом потенциале  $\varphi(r) = Q/\varepsilon r$ , создаваемом сферической заряженной частицей радиуса  $R$  с поверхностным зарядом  $Q$ , в стационарном режиме принимает вид

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = D_i \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \left( \frac{\partial c_i}{\partial r} - \frac{q_i c_i}{kT} \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) \right) \approx 0, \quad (17)$$

где  $i = \pm$  обозначает соответственно положительные ( $M^+$ ) и отрицательные ( $X^-$ ) ионы (с зарядом  $q_{\pm} = \pm e$ ), с граничным условием вдали от частицы

$$c_i(\infty) = c_{0,i}, \quad (18)$$

и имеет решение [13]

$$\begin{aligned} c_i(r) &= c_{0,i} e^{-\frac{q_i \varphi(r)}{kT}} \left( 1 - \frac{\Phi_i}{4\pi D_i c_{0,i}} \int_r^\infty e^{\frac{q_i \varphi(x)}{kT}} x^{-2} dx \right) = \\ &= c_{0,i} e^{-\frac{q_i Q}{\varepsilon k T r}} - \frac{\Phi_i}{4\pi D_i} \frac{\varepsilon k T}{q_i Q} \left( 1 - e^{-\frac{q_i Q}{\varepsilon k T r}} \right). \end{aligned} \quad (19)$$

Здесь поток ионов  $\Phi_i$  является первым интегралом уравнения (17), который рассчитывается как

$$\begin{aligned} \Phi_i &= -4\pi D_i \frac{q_i Q}{\varepsilon k T} \left( c_i(R) - c_{0,i} e^{-\frac{q_i Q}{\varepsilon k T R}} \right) \times \\ &\times \left( 1 - e^{-\frac{q_i Q}{\varepsilon k T R}} \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (20)$$

Конгруэнтный рост частицы (с сохранением стехиометрии  $MX$ ) в стационарном режиме происходит при условии

$$\Phi_+ = \Phi_- = \Phi, \quad (21)$$

которое определяет скорость роста частиц,

$$\frac{4\pi R^2}{\Omega} \frac{dR}{dt} = \Phi. \quad (22)$$

В этом случае из уравнения (19) следует

$$c_+(R) = c_{0,+} e^{-\frac{eQ}{\varepsilon k T R}} - \Phi \frac{\left( 1 - e^{-\frac{eQ}{\varepsilon k T R}} \right)}{4\pi D_+ \frac{eQ}{\varepsilon k T}}, \quad (23)$$

$$c_-(R) = c_{0,-} e^{\frac{eQ}{\varepsilon k T R}} + \Phi \frac{\left( 1 - e^{-\frac{eQ}{\varepsilon k T R}} \right)}{4\pi D_- \frac{eQ}{\varepsilon k T}}, \quad (24)$$

где заряд частицы  $Q$  рассчитывается из уравнения (11) как

$$\begin{aligned} Q &= 4\pi R^2 \Gamma_{max} q_i \sum_{i=+,-} \theta_i = \\ &= 4\pi R^2 e \left[ c_+(R) \tilde{K}_L^{(+)} - c_-(R) \tilde{K}_L^{(-)} \right], \end{aligned} \quad (25)$$

$\theta_i$  определяется уравнением (16), и

$$\tilde{K}_L^{(\pm)} = K_L^{(\pm)} \Gamma_{max}.$$

При  $Q \rightarrow 0$  из уравнений (23) и (24) получается

$$c_{\pm}(R) \rightarrow c_{0,\pm} - \frac{\Phi}{4\pi D_{\pm} R}$$

или

$$\Phi \rightarrow 4\pi D_{\pm} R [c_{0,\pm} - c_{\pm}(R)].$$

В предположении, что в экспериментах по определению точки нулевого заряда (ТНЗ) кристаллов иодида серебра (см., например, [14], также обсуждается в [4]) коллоидные частицы, выпадающие из состаренных растворов, были относительно большими ( $R \gg 1 \text{ нм}$ ) и близки к равновесию с окружающим раствором и поэтому не росли (т.е.  $\Phi \rightarrow 0$ ), получаем

$$c_{\pm}(R) \rightarrow c_{0,\pm}.$$

Следовательно, ТНЗ можно оценить с помощью уравнения (25) как

$$Q_{pzc} = 4\pi R^2 e \left[ c_{0,+} \tilde{K}_L^{(+)} - c_{0,-} \tilde{K}_L^{(-)} \right] = 0. \quad (26)$$

Принимая во внимание, что ТНЗ измеряли в [14] при

$$c_{0,+} \equiv c_{pzc,+} \approx 10^{-5.2} \text{ моль/дм}^3,$$

$$c_{0,-} \equiv c_{pzc,-} \approx 10^{-10.6} \text{ моль/дм}^3,$$

получаем

$$\frac{\tilde{K}_L^{(+)}}{\tilde{K}_L^{(-)}} \approx 10^{-5.4} \ll 1,$$

и, таким образом, первым членом в правой части уравнения (25) можно с хорошей точностью пренебречь в случае, когда отношение  $c_-(R)/c_+(R)$  не очень мало (как это происходит в расчетах ниже), что приводит к

$$Q \approx -4\pi R^2 e c_-(R) \tilde{K}_L^{(-)}. \quad (27)$$

В свою очередь  $\tilde{K}_L^{(-)}$  можно оценить из измерений плотности поверхностного заряда на поверхности частиц иодида серебра в тех же экспериментах [14] при  $r_{Ag} \approx r_I \approx 8$  (т.е.  $c_{0,+} \approx c_{0,-} \approx c_0 \approx 10^{-8}$  моль/дм<sup>3</sup>) в растворе с высокой концентрацией индифферентного электролита, равной 1М (моль/дм<sup>3</sup>), что обеспечивает малую длину экранирования (толщину двойного электрического слоя) по сравнению с радиусом частицы,  $R_D \sim 1 \text{ нм} \ll R$ , и, таким образом, позволяет пренебречь электростатическим потенциалом в уравнении диффузии (17) с хорошей точностью (см. разд. 3 ниже). В этом случае

$$c_{\pm}(R) = c_0 - \frac{\Phi}{4\pi D_{\pm}}$$

(см. уравнение (65) ниже), которое для стабилизированных частиц в состаренном растворе ( $c \rightarrow 0$ ) принимает вид  $c_{-}(R) \approx c_0$ . В этих экспериментах плотность поверхностного заряда составила  $\sigma \approx 3 \text{ мкКл/см}^2$  (см. рис. 7.15 в [4]), что позволяет по формуле (27) оценить

$$\tilde{K}_L^{(-)} \approx -\frac{\sigma}{ec_0} \approx 3 \cdot 10^{-2} \text{ м.}$$

В типичных условиях экспериментов по зародышеобразованию в чистых электролитах,  $c_{M+} = c_{X-} = c_0$  (см., например, [10, 15]), граничное условие (18) следует упростить до  $c_{0,i} = c_0$  с такой же заменой во всех последующих уравнениях.

### 2.2. Диффузионно-управляемый режим

В приближении диффузионно-управляемой кинетики, которое обычно принимают для роста кристаллов из раствора [16] (см. также обсуждение в [2]), на поверхности частицы ( $r = R$ ) поддерживается локальное равновесие,

$$\mu_{MX}(R) = \mu_{MX}^{(eq,R)}, \tag{28}$$

что, принимая во внимание уравнение (7), приводит к соотношению

$$c_{+}(R)c_{-}(R) = c^{*2} e^{\frac{2\gamma\Omega}{kTR}}. \tag{29}$$

Вблизи критического размера  $R \approx R^*$ , где частицы близки к равновесию с водным раствором, потоки близки к нулю,

$$\Phi_{+} = \Phi_{-} = \Phi \approx 0. \tag{30}$$

Подставив уравнения (23) и (24) (с  $c_{0,-} = c_{0,+} = c_0$ ) в (29) и пренебрегая малыми членами  $\propto \Phi^2$ , получаем

$$\begin{aligned} \Phi = & -4\pi c_0 \frac{eQ}{\varepsilon kT} \times \\ & \times \frac{D_{-} D_{+}}{D_{-} \left[ 1 - e^{-\frac{eQ}{\varepsilon kTR}} \right] - D_{+} \left[ 1 - e^{-\frac{eQ}{\varepsilon kTR}} \right]} \times \\ & \times \left[ 1 - S^{-2} e^{\frac{2\gamma\Omega}{kTR}} \right] = \\ & = \Phi_c - \Phi_e, \tag{31} \end{aligned}$$

где  $S = c_0/c^*$  — степень пересыщения,  $\Phi_c$  — поток захвата (или конденсации) ионов, а  $\Phi_e$  — поток эмиссии (или испарения) ионов.

При подстановке уравнений (24) и (31) в (27) получается уравнение для заряда частицы

$$\begin{aligned} Q(R) \approx & -4\pi R^2 e \tilde{K}_L^{(-)} c_0 \left\{ e^{\frac{eQ}{\varepsilon kTR}} - \right. \\ & \left. - \frac{D_{+} \left[ 1 - e^{-\frac{eQ}{\varepsilon kTR}} \right]}{D_{-} \left[ 1 - e^{-\frac{eQ}{\varepsilon kTR}} \right] - D_{+} \left[ 1 - e^{-\frac{eQ}{\varepsilon kTR}} \right]} \times \right. \\ & \left. \times \left[ 1 - S^{-2} e^{\frac{2\gamma\Omega}{kTR}} \right] \right\}, \tag{32} \end{aligned}$$

решение которого необходимо подставить в (31), чтобы найти  $\Phi$ .

Следует отметить, что ненулевой заряд  $Q(R)$  изменит свободную энергию образования частиц,

$$\Delta G_0(R) = \frac{4\pi}{3} R^3 \left( \mu_{MX}^{(s)} - \mu_{MX} \right) + 4\pi\gamma R^2 + \frac{Q^2}{2\varepsilon R},$$

и, таким образом, изменит условие равновесия Гиббса–Кельвина (7), которое выводится из условия экстремума

$$\frac{d\Delta G_0(R)}{dR} = 0,$$

с учетом

$$MX^{(s)} = \mu_{MX}^{(eq,\infty)}.$$

Однако этим изменением можно с хорошей точностью пренебречь вблизи критической точки  $R \approx R^*$ , принимая во внимание относительно малый вклад в свободную энергию электростатической энергии заряженного критического зародыша по сравнению с его поверхностной энергией,

$$\frac{Q^{*2}}{2\varepsilon R^*} \ll 4\pi\gamma R^{*2},$$

для рассчитанных ниже в разд. 2.3 значений  $Q^*$  в рассматриваемом диапазоне критического радиуса  $0.25 \text{ нм} \ll R^* \ll 1 \text{ мкм}$ .

### 2.3. Скорость зарождения

Согласно классической теории нуклеации [6, 7], адаптированной к рассматриваемому случаю сильных электролитов, скорость зарождения рассчитывается как

$$\dot{N} \approx \left( \int_0^{\infty} \frac{dn}{\omega \rho_0(n)} \right)^{-1} \approx \omega^* \rho_0(n^*) Z, \quad (33)$$

где  $\rho_0(n)$  – равновесная функция распределения зародышей ( $n$ -меров, состоящих из  $n$  молекул MX) с радиусами  $R_n = (3\Omega n/4\pi)^{1/3}$  по размерам;  $n^*$  – число молекул MX (мономеров) в критическом зародыше;  $\omega^*$  – скорость присоединения ионов ( $M^+$  и  $X^-$ ) из водного раствора (метастабильной фазы) к критическому зародышу радиуса  $R^* = R(n^*)$ ;  $Z$  – неравновесный фактор Зельдовича [8]. В этой теории зародышеобразование описывается перемещением частиц в фазовом пространстве размеров  $n$ , при этом скорость зародышеобразования рассчитывается как стационарный поток частиц между соседними размерными классами. В текущей задаче стационарный поток  $\Phi_n$  зародышей между соседними размерными классами  $n$  и  $n-1$  может быть представлен как

$$\Phi_n = \Phi_n^{(c)} - \Phi_n^{(e)} = \omega_{n-1} \rho(n-1) - \omega'_n s_n \rho(n), \quad (34)$$

где  $\Phi_n^{(c)}$  – (конгруэнтный) поток ионов каждого типа (положительных или отрицательных), конденсирующихся на частицах размером  $n-1$  с концентрацией зародышей  $\rho(n-1)$ , а  $\Phi_n^{(e)}$  – эмиссионный поток ионов от зародышей размером  $n$  с концентрацией  $\rho(n)$ . В соответствии с определением потоков конденсации и эмиссии в уравнении (31), скорость захвата (конденсации) ионов  $n$ -мером рассчитывается как

$$\omega_n = -4\pi c_0 \frac{eQ}{\varepsilon kT} \times \frac{D_- D_+}{D_- \left[ 1 - e^{-\frac{eQ}{\varepsilon kTR}} \right] - D_+ \left[ 1 - e^{-\frac{eQ}{\varepsilon kTR}} \right]}, \quad (35)$$

а скорость эмиссии (испарения) ионов  $n$ -мером как

$$\omega'_n = \omega_n S^{-2} e^{\frac{2\gamma\Omega}{kTRn}}. \quad (36)$$

Следовательно, равновесная функция распределения по размерам  $\rho_0(n)$ , соответствующая условию  $\Phi_n = 0$  при всех  $n$ , подчиняется условию равновесия

$$\omega_{n-1} \rho_0(n-1) - \omega'_n \rho_0(n) = 0. \quad (37)$$

Для самосогласованности приведенных выше выражений для  $\omega_n$  и  $\omega'_n$ , полученных в диффузионном (континуальном) приближении для больших ядер,  $n \gg 1$ , можно пренебречь различием скоростей конденсации на ядрах соседних (дискретных) классов,  $\omega_n \approx \omega_{n-1}$ , что приводит к рекуррентному соотношению

$$\frac{\rho_0(n-1)}{\rho_0(n)} \approx \frac{\omega'_n}{\omega_n} = S^{-2} e^{\frac{2\gamma\Omega}{kTRn}}, \quad (38)$$

которое согласуется с условием равновесия Гиббса–Кельвина (7). Оно соответствует термодинамическому равновесию на границе раздела и поэтому не зависит от кинетического механизма массопереноса между двумя фазами (осуществляемого либо за счет переноса молекул MX, либо за счет конгруэнтного переноса ионов  $M^+$  и  $X^-$ ).

Это соотношение можно использовать для нахождения  $\rho_0(n)$  (см., например, [17]),

$$\begin{aligned} \frac{\rho_0(1)}{\rho_0(n)} &= \frac{\rho_0(1)}{\rho_0(2)} \frac{\rho_0(2)}{\rho_0(3)} \dots \frac{\rho_0(n-1)}{\rho_0(n)} \approx \\ &\approx \frac{1}{S^{2(n-1)}} \exp \left[ \left( \frac{4\pi}{3} \right)^{1/3} \frac{2\gamma\Omega^{2/3}}{kT} \sum_{i=2}^n i^{-1/3} \right] \approx \\ &\approx \frac{1}{S^{2(n-1)}} \exp \left[ \left( \frac{4\pi}{3} \right)^{1/3} \frac{2\gamma\Omega^{2/3}}{kT} \int_0^n i^{-1/3} di \right], \quad (39) \end{aligned}$$

где  $\rho_0(1)$  – количество мономеров (молекул MX) в растворе, которое, в соответствии с уравнением (5), равно  $c_{MX} = K_I c_0^2$ . Это приводит к соотношению

$$\begin{aligned} \rho_0(n) &= K_I c_0^2 S^{2(n-1)} \exp \left[ -\frac{3\gamma\Omega}{kT} \left( \frac{4\pi}{3\Omega} \right)^{1/3} n^{2/3} \right] = \\ &= K_I c_0^2 \exp \left[ -\frac{3\gamma\Omega}{kT} \left( \frac{4\pi}{3\Omega} \right)^{1/3} n^{2/3} + 2(n-1) \ln S \right], \quad (40) \end{aligned}$$

которое в рассматриваемом пределе  $n \gg 1$  можно представить в виде

$$\begin{aligned} \rho_0(n) &\approx K_I c_0^2 \exp \left[ -\frac{3\gamma\Omega}{kT} \left( \frac{4\pi}{3\Omega} \right)^{1/3} n^{2/3} + 2n \ln S \right] = \\ &= K_I c_0^2 \exp \left( -\frac{\Delta G_0(n)}{kT} \right), \quad (41) \end{aligned}$$

где

$$\Delta G_0(n) = 3\gamma\Omega \left( \frac{4\pi}{3\Omega} \right)^{1/3} n^{2/3} - 2kTn \ln S, \quad (42)$$

что совпадает со свободной энергией образования кластера (без учета поверхностного заряда, в соот-

ветствии с предположением о несущественном вкладе электростатической энергии в  $\Delta G_0(n)$ , приведенном выше в разд. 2.2 и подтвержденным численной оценкой ниже).

Небольшое расхождение между показателями экспоненты в уравнениях (40) и (41),  $n \leftrightarrow n - 1$ , возникло из-за упрощений при выводе уравнения (40), связанных с неприменимостью уравнения (39) для малых  $n$ . Однако в критической точке эта поправка имеет относительную погрешность

$$\frac{2kT \ln S}{\Delta G_0(n^*)} = \frac{2}{n^*} \ll 1,$$

и поэтому ею можно с хорошей точностью пренебречь, в соответствии с более точным термодинамическим рассмотрением (см. [18]).

Критическое значение  $n^*$  вычисляется из условия экстремума

$$\left(\frac{d\rho_0(n)}{dn}\right)_{n=n^*} = -\rho_0(n^*) \frac{1}{kT} \left(\frac{d\Delta G_0(n)}{dn}\right)_{n=n^*} = 0,$$

как

$$n^* = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{\gamma}{kT \ln S}\right)^3 \Omega^2, \quad (43)$$

или

$$R^* = \frac{\gamma\Omega}{kT \ln S}, \quad (44)$$

и, таким образом,

$$\Delta G_0^* \equiv \Delta G_0(n^*) = \frac{4\pi\gamma^3\Omega^2}{3(kT)^2 \ln^2 S}, \quad (45)$$

что приводит к соотношению

$$\rho_0(n^*) \approx K_I c_0^2 \exp\left[-\frac{4\pi\gamma^3\Omega^2}{3(kT)^3 \ln^2 S}\right]. \quad (46)$$

Неравновесный фактор Зельдовича  $Z$  вычисляется в приближении Фоккера-Планка седловым методом путем разложения показателя  $\Delta G_0(n)$  под интегралом в окрестности резкого максимума при  $n = n^*$  и пренебрегая гораздо более медленной зависимостью предэкспоненциального множителя от  $n$  (см. [8]),

$$Z = \left[-\frac{1}{2\pi kT} \left(\frac{d^2\Delta G_0(n)}{dn^2}\right)_{n=n^*}\right]^{1/2} = \frac{(kT)^{3/2} \ln^2 S}{2\pi\gamma^{3/2}\Omega}. \quad (47)$$

Скорость конденсации в критической точке выводится из уравнения (35) как

$$\omega^* = -4\pi c_0 \frac{eQ^*}{\varepsilon kT} \times$$

$$\times \frac{D_- D_+}{D_- \left[1 - e^{-\frac{eQ^*}{\varepsilon kT R}}\right] - D_+ \left[1 - e^{-\frac{eQ^*}{\varepsilon kT R}}\right]}, \quad (48)$$

где  $Q^*$  является решением уравнения (32) при  $R = R^*$ , которое с учетом соотношения

$$S^{-2} \exp\left(\frac{2\gamma\Omega}{kT R^*}\right) - 1 = 0$$

(см. (44)), принимает вид

$$-\frac{eQ^*}{\varepsilon kT R^*} = \lambda R^* \exp\left(\frac{eQ^*}{\varepsilon kT R^*}\right), \quad (49)$$

где

$$\lambda = 4\pi \frac{e^2 \tilde{K}_L^{(-)}}{\varepsilon kT} c_0 \approx 2 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1}.$$

В области применимости теории нуклеации  $0.25 \text{ нм} \ll R^* \ll 1 \text{ мкм}$  (см. разд. 1) решение уравнения (49) для заряда  $Q^*$  является отрицательной величиной, изменяющейся в пределах  $1 \ll |Q^*/e| \ll 6.5 \cdot 10^3$ , рис. 1, при этом поверхностная плотность заряда изменяется в пределах  $1 \text{ мкКл/см}^2 \gg |\sigma^*| \gg 8.2 \cdot 10^{-3} \text{ мкКл/см}^2$ , рис. 2.

Следует обратить внимание, что эти значения соответствуют относительно небольшим покрытиям,  $\theta_+ \ll \theta_- \ll 1$ , как предполагалось в уравнении (16), и относительно малой электростатической энергии критического зародыша

$$\frac{Q^{*2}}{2\varepsilon R^*} \ll 4\pi\gamma R^{*2},$$

как предполагалось в разд. 2.2.

В итоге окончательное выражение для скорости нуклеации принимает вид

$$\begin{aligned} \dot{N} = & -2 \frac{(kT)^{1/2}}{\gamma^{3/2}\Omega} K_I c_0^3 \frac{eQ^*}{\varepsilon} \ln^2 S \times \\ & \times \frac{D_- D_+}{D_- \left[1 - e^{-\frac{eQ^*}{\varepsilon kT R}}\right] - D_+ \left[1 - e^{-\frac{eQ^*}{\varepsilon kT R}}\right]} \times \\ & \times \exp\left[-\frac{4\pi\gamma^3\Omega^2}{3(kT)^3 \ln^2 S}\right], \quad (50) \end{aligned}$$

которое можно использовать для анализа экспериментальных наблюдений.

#### 2.4. Сравнение с предшествующими моделями

Для облегчения сравнения с выражениями из литературы, полученными без учета заряда частиц, сначала рассмотрим предел  $\left|\frac{eQ^*}{\varepsilon kT R^*}\right| \ll 1$ , в котором уравнение (50) преобразуется к виду

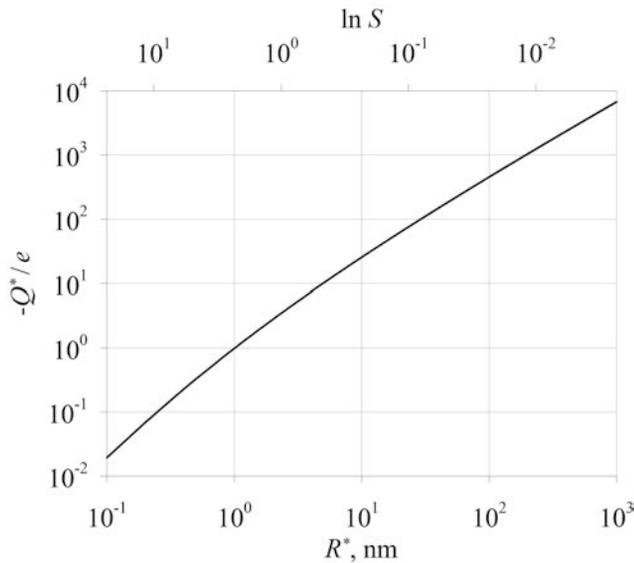


Рис. 1. Зависимость поверхностного заряда  $Q^*$  от радиуса критического зародыша  $R^*$ , рассчитанная по формуле (49)

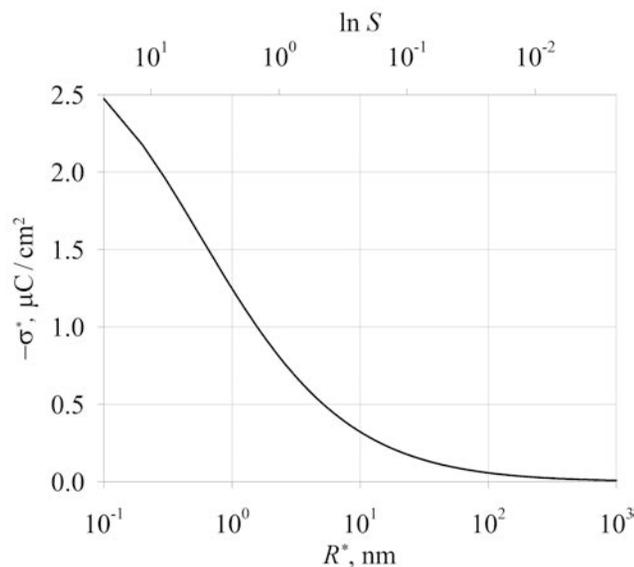


Рис. 2. Зависимость плотности поверхностного заряда  $\sigma^* = Q^*/4\pi R^{*2}$  от радиуса критического зародыша  $R^*$ , рассчитанная по формуле (49)

$$\dot{N} \approx 2 \left( \frac{kT}{\gamma} \right)^{1/2} \frac{D_- D_+}{D_- + D_+} K_I c_0^3 \ln S \times \exp \left[ -\frac{4\pi\gamma^3 \Omega^2}{3(kT)^3 \ln^2 S} \right], \quad (51)$$

имеющее кубическую зависимость от концентрации ионов  $K_I c_0^3$ , отличную от  $c_0^{7/3} v^{1/3}$  в [10, 15] и от  $c_0 v^{-1}$  в [19], где  $v \approx 10^{-28} - 10^{-29} \text{ м}^3$  — объем молекулы растворителя,  $c_0 \approx 6 \cdot 10^{18} \text{ м}^{-3}$  для AgI. Измеренные

значения  $K_I$  для большинства малорастворимых солей находятся в диапазоне  $10^3 - 10^5 \text{ М}^{-1}$  (например,  $\approx 10^5 \text{ М}^{-1}$  для AgBr,  $\approx 10^3 \text{ М}^{-1}$  для AgCl и BaSO<sub>4</sub> [20] (см. также [21]),  $\approx 10^4 \text{ М}^{-1}$  для AgI [22]). Это приводит к занижению скорости нуклеации примерно в  $10^1 - 10^2$  раз в модели [10, 15] и завышению примерно в  $10^{11}$  раз в модели [19].

Однако в области применимости теории нуклеации,  $0.25 \text{ нм} \ll R^* \ll 1 \text{ мкм}$ , влиянием заряда критического зародыша  $Q^*$  на скорость зародышеобразования пренебрегать нельзя. Действительно, в соответствии с приведенной выше оценкой (49), параметр

$$\beta = \exp(-\alpha) = \exp \left( \frac{eQ^*}{\varepsilon kTR^*} \right)$$

изменяется в пределах  $2 \cdot 10^{-2} \leq \beta \leq 2 \cdot 10^{-1}$  при  $2 \cdot 10^{-3} \ll \ln S \ll 7$ , как видно из рис. 3, и, таким образом, первым членом в знаменателе уравнения (50) можно с хорошей точностью пренебречь, что приводит к выражению

$$\dot{N} \approx \beta 2 \left( \frac{kT}{\gamma} \right)^{1/2} D_- K_I c_0^3 \ln S \times \exp \left[ -\frac{4\pi\gamma^3 \Omega^2}{3(kT)^3 \ln^2 S} \right]. \quad (52)$$

Поэтому множитель  $\beta$ , связанный с зарядом зародыша, практически компенсирует расхождение между предэкспоненциальными множителями в уравнении (52) и в модели [10, 15], в связи с чем можно ожидать хорошее согласие между предсказаниями новой модели и измерениями (рассмотренными в [10]). С другой стороны, расхождение с предсказаниями [19] еще больше возрастет, если учесть влияние заряда зародыша.

Применительно к водному раствору BaSO<sub>4</sub> ( $c_0 \approx 10^{-5} \text{ М} \approx 6 \cdot 10^{21} \text{ м}^{-3}$ ) при степени пересыщения  $S = (1-4) \cdot 10^3$ , т.е.  $c^* \approx 10^{24} \text{ м}^{-3}$ , в экспериментах [23, 24], рассматриваемых в [19], влияние заряда становится малым,  $\beta \approx 1$ . Однако классическая теория нуклеации в данном случае неприменима, так как  $R^* \approx 0.2 \text{ нм}$  и  $n^* \leq 1$ , т.е. не выполняется ключевое требование теории  $n^* \gg 1$ , а значит, анализ [19] становится неприменимым. Та же проблема возникает и в других коллоидных системах (с критическим размером в несколько ангстрем), рассматриваемых в [3]. Поскольку в этих системах критический зародыш состоит всего из нескольких молекул, проблему следует рассматривать микроскопически, т.е. в атомистическом подходе (обзор которого содержится, например, в [25]).

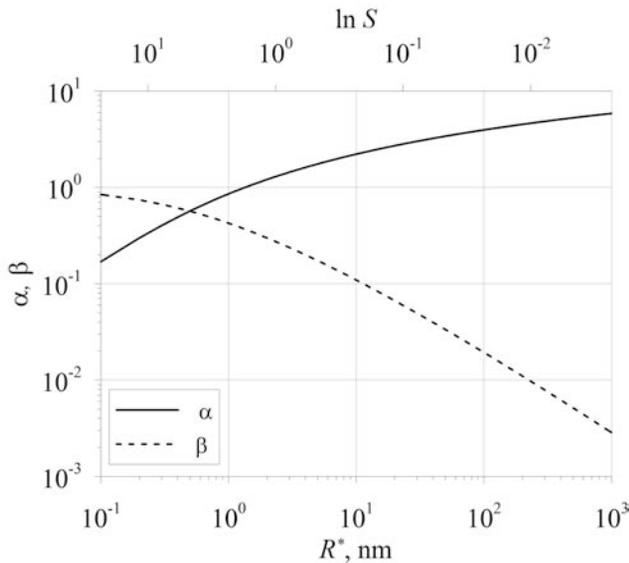


Рис. 3. Зависимости параметров  $\alpha = -\frac{eQ^*}{\varepsilon kTR^*}$  и  $\beta = e^{-\alpha} = e^{\frac{eQ^*}{\varepsilon kTR^*}}$  от критического радиуса  $R^*$ , рассчитанные по формуле (49)

### 2.5. Режим, контролируемый поверхностной реакцией

В рассмотренном выше диффузионно-управляемом режиме предполагалось локальное равновесие на поверхности частицы, характеризующееся равновесным значением химического потенциала молекул MX вблизи поверхности частицы,  $\mu_{MX}(R) = \mu_{MX}^{(eq)}$  (см. уравнение (28)).

В более общем подходе локальное равновесие на поверхности частицы не предполагается, поэтому необходимо учитывать конечную скорость поверхностной реакции (см. [10]). В соответствии с общими принципами необратимой термодинамики, при малом отклонении от состояния равновесия на поверхности частицы, характеризуемом величиной

$$\Delta\mu_{MX} = \mu_{MX}(R) - \mu_{MX}^{(eq)} \ll \mu_{MX}^{(eq)},$$

в пограничном слое жидкости вблизи межфазной границы возникает поток массы, пропорциональный этому отклонению,

$$\begin{aligned} \Phi &= 4\pi R^2 k_r \frac{\Delta\mu_{MX}}{kT} = 4\pi R^2 k_r \ln \frac{c_{MX}(R)}{c_{MX}^{(eq,R)}} \approx \\ &\approx 4\pi R^2 k_r \frac{c_{MX}(R) - c_{MX}^{(eq,R)}}{c_{MX}^{(eq,R)}}, \end{aligned} \quad (53)$$

где  $k_r$  — кинетическая константа, или константа поверхностной реакции. Несмотря на то, что уравнение (53) выражается через химический потенциал

молекул MX, кинетический механизм массопереноса между двумя фазами реализуется конгруэнтным переносом ионов  $M^+$  и  $X^-$  (см. комментарии к уравнению (38)).

В этой ситуации диффузионный поток к частице можно рассчитать из уравнений массопереноса, представленных в разд. 2.1, но с новым граничным условием

$$c_+(R)c_-(R) = K_I^{-1}c_{MX}(R), \quad (54)$$

где, в отличие от уравнения (29), граничная концентрация молекул MX,  $c_{MX}(R)$ , не считается равновесной,  $\mu_{MX}(R) \neq \mu_{MX}^{(eq)}$ . Это граничное условие приводит к модифицированному выражению для конгруэнтных потоков ионов вместо уравнения (31),

$$\begin{aligned} \Phi_+ = \Phi_- = \Phi &\approx -4\pi R c_0 \frac{eQ}{\varepsilon kTR} \times \\ &\times \frac{D_- D_+}{D_- \left[1 - e^{\frac{eQ}{\varepsilon kTR}}\right] - D_+ \left[1 - e^{-\frac{eQ}{\varepsilon kTR}}\right]} \times \\ &\times \left[1 - \frac{1}{K_I c_0^2} c_{MX}(R)\right], \end{aligned} \quad (55)$$

которые должны сшиваться с кинетическим потоком на границе раздела, представленным в уравнении (53),

$$\begin{aligned} \Phi &= A \left[1 - \frac{1}{K_I c_0^2} c_{MX}(R)\right] = \\ &= 4\pi R^2 k_r \left[\frac{c_{MX}(R) - c_{MX}^{(eq)}}{c_{MX}^{(eq)}}\right], \end{aligned} \quad (56)$$

где

$$\begin{aligned} A &= -4\pi R c_0 \frac{eQ}{\varepsilon kTR} \times \\ &\times \frac{D_- D_+}{D_- \left[1 - e^{\frac{eQ}{\varepsilon kTR}}\right] - D_+ \left[1 - e^{-\frac{eQ}{\varepsilon kTR}}\right]}, \end{aligned}$$

и

$$c_{MX}^{(eq,R)} = K_I c^{*2} e^{\frac{2\gamma\Omega}{kTR}}.$$

Решением уравнения (56) является

$$c_{MX}(R) = c_{MX}^{(eq,R)} \frac{A + 4\pi R^2 k_r}{\left[4\pi R^2 k_r + AS^{-2} \exp\left(\frac{2\gamma\Omega}{kTR}\right)\right]}, \quad (57)$$

которое после подстановки в уравнение (53) приводит к соотношению

$$\Phi = 4\pi R^2 k_r A \frac{1 - S^{-2} \exp\left(\frac{2\gamma\Omega}{kTR}\right)}{4\pi R^2 k_r + AS^{-2} \exp\left(\frac{2\gamma\Omega}{kTR}\right)}. \quad (58)$$

В пределе

$$\frac{4\pi R^2 k_r}{A} \rightarrow \infty,$$

соответствующем диффузионно-управляемому режиму, уравнение (58) корректно сводится к уравнению (31), а в противоположном пределе режима, контролируемого поверхностной реакцией,

$$\frac{4\pi R^2 k_r}{A} \rightarrow 0,$$

принимает вид

$$\Phi \approx 4\pi R^2 k_r \left[ S^2 \exp\left(-\frac{2\gamma\Omega}{kTR}\right) - 1 \right]. \quad (59)$$

Поверхностный заряд частицы в этом режиме рассчитывается путем подстановки (59) в (27),

$$Q \approx -4\pi R^2 e c_-(R) \tilde{K}_L^{(-)} = -4\pi R^2 e \tilde{K}_L^{(-)} \times \left\{ c_0 e^{\frac{eQ}{\varepsilon kTR}} + k_r \left[ S^2 \exp\left(-\frac{2\gamma\Omega}{kTR}\right) - 1 \right] \times \frac{\left(1 - e^{\frac{eQ}{\varepsilon kTR}}\right)}{4\pi D_- \frac{eQ}{\varepsilon kT}} \right\}, \quad (60)$$

что для критического радиуса  $R = R^*$ , подчиняющегося соотношению

$$S^{-2} \exp\left(\frac{2\gamma\Omega}{kTR^*}\right) - 1 = 0,$$

дает

$$Q^* = -4\pi R^{*2} e \tilde{K}_L^{(-)} c_0 \exp\left(\frac{eQ^*}{\varepsilon kTR^*}\right), \quad (61)$$

что совпадает с уравнением (49), полученным для диффузионно-управляемого режима, и, таким образом, описывается зависимостью  $Q^*(R^*)$ , представленной на рис. 1. Однако, в отличие от диффузионно-управляемого режима, поверхностный заряд не влияет на скорость нуклеации (в принятом приближении относительно низкой плотности поверхностного заряда  $|\sigma| \leq 20$  мКл/см<sup>2</sup>, см. комментарии к уравнению (16), которое заведомо выполняется для критического зародыша, см. рис. 2).

Действительно, поскольку скорость конденсации для критического зародыша, полученная из уравнения (59), равна

$$\omega^* = 4\pi \left(\frac{\gamma\Omega}{kT \ln S}\right)^2 k_r, \quad (62)$$

скорость зародышеобразования в режиме, контролируемом поверхностной реакцией, принимает вид

$$\dot{N} \approx 2k_r \left(\frac{\gamma}{kT}\right)^{1/2} K_I c_0^2 \Omega \exp\left[-\frac{4\pi\gamma^3\Omega^2}{3(kT)^3 \ln^2 S}\right]. \quad (63)$$

Поскольку в режиме, контролируемом поверхностной реакцией, скорость зародышеобразования не зависит от поверхностного заряда, уравнение (63) оказывается применимым во всем диапазоне длин экранирования и, таким образом, не зависит от растворимости сильных электролитов (т.е. применимо как для малорастворимых, так и для хорошо растворимых солей).

### 3. ХОРОШО РАСТВОРИМЫЕ СОЛИ

В пределе хорошо растворимых коллоидов с  $c^* \geq 1$  М, например, KCl, NaCl, KNO<sub>3</sub>, длина экранирования (толщина двойного электрического слоя) оценивается как  $R_D \sim 0.25$  нм и оказывается малой по сравнению с радиусом зародыша,  $R \gg 0.25$  нм (см. разд. 1), т.е.  $R_D \ll R$ . В этом случае электростатическим потенциалом в уравнении диффузии (17) с хорошей точностью можно пренебречь, так что его решение (20) значительно упрощается и приводит к выражению

$$\Phi_i = -4\pi D_i R [c_i(R) - c_0]. \quad (64)$$

При условии (21) конгруэнтного роста частиц (с сохранением стехиометрии MX) в стационарном режиме, граничные концентрации рассчитываются как

$$c_{\pm}(R) = c_0 - \frac{\Phi}{4\pi D_{\pm} R}. \quad (65)$$

Подставляя эти значения в граничное условие (29) и пренебрегая в окрестности критического радиуса  $R \approx R^*$  членами второго порядка малости по  $\Phi$ , вместо (31) получаем

$$\Phi \approx 4\pi R c_0 \frac{D_- D_+}{D_+ + D_-} \left[ 1 - S^{-2} \exp\left(\frac{2\gamma\Omega}{kTR}\right) \right]. \quad (66)$$

Таким образом, все результаты разд. 2 для диффузионно-управляемого режима могут быть воспроизведены формальной заменой  $Q = 0$ , что приводит к уравнению, эквивалентному (51) (полученному в пределе  $\left|\frac{eQ^*}{\varepsilon kTR^*}\right| \ll 1$ ),

$$\dot{N} \approx 2 \left(\frac{kT}{\gamma}\right)^{1/2} \frac{D_- D_+}{D_- + D_+} K_I c_0^3 \ln S \exp\left[-\frac{4\pi\gamma^3\Omega^2}{3(kT)^3 \ln^2 S}\right]. \quad (67)$$

Основное расхождение с предшествующими моделями в этом случае связано со значением предэкспоненциального множителя, как обсуждалось выше в разд. 2.4.

Для хорошо растворимых коллоидов существует только первое ограничение теории зародышеобразования,  $n^* \gg 1$ , что приводит к ограничению для степени пересыщения,  $S \ll 10^3$ . Однако при более высоких степенях пересыщения критический зародыш состоит из нескольких молекул и, следовательно, должен рассматриваться в рамках атомистического подхода.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Критически анализируется и развивается теория нуклеации ионных солей-сильных электролитов из водных растворов. Показано, что для применимости классической теории нуклеации (предполагающей для размера критического зародыша  $n^*$  соотношение

$$n^* = \frac{4\pi R^{*3}}{3\Omega} \gg 1,$$

или  $R^* \gg 0.25$  нм) можно рассматривать только относительно небольшие степени пересыщения,  $S \ll 10^3$ .

В случае малорастворимых солей с относительно большой длиной экранирования  $R_D \gg R^*$  (где  $R_D \approx 1$  мкм для AgI) классическая теория нуклеации должна быть модифицирована с учетом влияния заряда критического зародыша  $Q^*$  на скорость зародышеобразования. Для диффузионно-управляемого режима роста частиц показано, что в области применимости модели  $0.25$  нм  $\ll R^* \ll R_D \approx 1$  мкм (или  $2 \cdot 10^{-3} \ll \delta \ll 10^3$ , где  $\delta = S - 1$  — относительный коэффициент пересыщения), дополнительный экспоненциальный множитель

$$\beta = \exp\left(\frac{eQ^*}{\varepsilon kTR^*}\right),$$

не учитываемый в более ранних моделях и плавно изменяющийся с  $\delta$  в диапазоне  $2 \cdot 10^{-2} \leq \beta \leq 2 \cdot 10^{-1}$ , заметно снижает скорость нуклеации.

Сравнение с более ранними исследованиями показывает, что основное расхождение с моделью [19] связано с предэкспоненциальным множителем, который приводит к дополнительному завышению скорости нуклеации в [19] примерно в  $10^{11}$  раз. В модели [10, 15], напротив, предэкспоненциальный множитель занижен примерно в  $10^1$ – $10^2$  раз, что, однако, хорошо компенсируется экспоненциальным множителем  $\beta$  (не учитываемым в [10, 15]). По этой

причине можно ожидать хорошего согласия между предсказаниями новой модели и измерениями (анализируемыми в [10]).

Модель может быть расширена для рассмотрения более общего случая конечной скорости поверхностной реакции. В частности, показано, что в предельном случае роста частиц, контролируемом поверхностной реакцией, заряд поверхности не влияет на скорость зародышеобразования.

Аналогичный вывод сделан для хорошо растворимых солей, для которых характерна относительно небольшая длина экранирования  $R_D \sim 0.25$  нм  $\ll R^*$ . При этом основное расхождение с более ранними моделями связано со значением предэкспоненциального фактора в выражении для скорости зародышеобразования, которое может достигать нескольких порядков величины.

**Благодарности.** Автор благодарит В.И. Тарасова (ИБРАЭ РАН) за критическое прочтение рукописи, ценные замечания и помощь в численных расчетах (рис. 1–3).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. R. H. Doremus, J. of Physical Chemistry **62**, 1068 (1958).
2. P.-P. Chiang, M. D. Donohue, J. of Colloid and Interface Science **122**, 230 (1988).
3. P.-P. Chiang, M. D. Donohue, J. L. Katz, J. of Colloid and Interface Science **122**, 251 (1988).
4. R. J. Hunter, *Introduction to modern colloid science* Oxford University Press (1993).
5. J. Lyklema, *Fundamentals of Interface and Colloid Science*, Vol. II: *Solid-Liquid Interfaces*, Academic Press (1995).
6. M. Volmer and A. Weber, Z. Phys. Chem. **119**, 253 (1926).
7. R. Becker and W. Doering, Ann. Phys. **24**, 719 (1935).
8. Я. Б. Зельдович, ЖЭТФ **12**, 525 (1942).
9. T.P. Melia, J. of Applied Chemistry **15**, 345 (1965).
10. A. Mersmann, M. Kind, Chemical Engineering and Technology **11**, 264 (1988).
11. A. W. Adamson, *Textbook of Physical Chemistry* Academic Press (1973).
12. G. J. Janz, R. P. T. Tomkins, C. B. Allen, J. R. Downey Jr., and S. K. Singer, J. of Physical and Chemical Reference Data **6**, 409 (1977).

13. P. Arendt and Kallmann, H., *Z. fur Physik*, **35**, 421 (1926).
14. J. Tb. G. Overbeek, in: *Colloid Science*, Vol. I, ed. by H. R. Kruyt, p.162, Elsevier, Amsterdam (1952).
15. M. Kind and A. Mersmann, *Chemie Ingenieur Technik* **55**, 720 (1983).
16. A. A. Chernov, *Soviet Physics Uspekhi* **4**, 116 (1961).
17. S. K. Friedlander, *Smoke, Dust and Haze: Fundamentals of Aerosol Behaviour*, New York (1977).
18. M. S. Veshchunov, *J. of Nuclear Materials* **571**, 154021 (2022).
19. D. Kashchiev and G. M. Van Rosmalen, *Crystal Research and Technology: J. of Experimental and Industrial Crystallography* **38**, 555 (2003).
20. L.G. Sillen and A.E. Martell, *Soil Science* **100**, 74 (1964).
21. A. E. Nielsen, *Pure and Applied Chemistry* **53**, 2025 (1981).
22. J.H. Jonte and D.S. Martin, *Journal of the American Chemical Society* **74**, 2052 (1952).
23. A. E. Nielsen, *Acta Chem. Scand.* **15**, 441 (1961).
24. A. E. Nielsen, *Kristall Technik* **4**, 17 (1969).
25. G. C. Sosso, J. Chen, S. J. Cox, M. Fitzner, P. Pedevilla, A. Zen, and A. Michaelides, *Chem. Rev.* **116**, 7078 (2016).

# ИНДУЦИРОВАННЫЙ ЗАРЯД В ДИХАЛЬКОГЕНИДАХ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

И. С. Терехов\*

Институт ядерной физики им. Г. И. Буджера Сибирского отделения Российской академии наук  
630090, Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 5 ноября 2022 г.,  
после переработки 29 ноября 2022 г.  
Принята к публикации 5 декабря 2022 г.

Исследуется асимптотика плотности заряда  $\rho_{ind}(\mathbf{r})$ , индуцированного азимутально-симметричной потенциальной ямой конечного радиуса  $R$ . Получено аналитическое выражение для  $\rho_{ind}(\mathbf{r})$  на расстояниях  $r \gg R$ . Показано, что для широкой области параметров потенциала плотность индуцированного заряда может быть представлена в виде  $\rho_{ind}(\mathbf{r}) = F(r)\mathcal{L}_V$ , где  $F(r)$  зависит только от расстояния, а  $\mathcal{L}_V$  — от параметров потенциала. Также исследуется поведение плотности индуцированного заряда при глубине потенциальной ямы, близкой к критическому значению.

DOI: 10.31857/S004445102306010X  
EDN: DGECBC

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Хорошо известно, что внешнее поле приводит к появлению поляризационных эффектов в материале. Так, в поле примеси возникает плотность индуцированного заряда  $\rho_{ind}(\mathbf{r})$ , внешнее магнитное поле индуцирует ток, а также может приводить к эффекту Бомы–Ааронова. Такого типа явления описываются как эффекты поляризации вакуума, т. е. основного состояния системы. Эффекты поляризации вакуума возникают в различных системах. Так, в рамках квантовой электродинамики исследуется плотность заряда, индуцированного кулоновским полем иона [1–4]. В графене плотность заряда, индуцированного полем кулоновской примеси, исследовалась в работах [5–16]. Плотность индуцированного заряда в графене в случае локализованного потенциала подробно рассматривалась в [17].

В настоящей работе мы исследуем поведение плотности заряда, индуцированного локализованным потенциалом, в двумерных дихалькогенидах переходных металлов (ДПМ). Эти материалы относятся к так называемым графеноподобным, или дираковским материалам, поскольку движение заряженных одночастичных возбуждений электронного

газа описывается  $(2+1)$ -мерным уравнением Дирака [18]. Отметим, что безразмерная константа взаимодействия между электронами (аналог постоянной тонкой структуры) в ДПМ не мала, поэтому в ДПМ реализуется некоторый вариант  $(2+1)$ -мерной квантовой электродинамики с сильной связью. Кроме того, в экспериментах можно создавать различные внешние поля, в том числе и достаточно сильные. Поэтому исследование эффектов поляризации вакуума внешними полями в ДПМ также позволяет изучать и непертурбативные эффекты, аналогичные эффектам квантовой электродинамики, например, рождение электрон-позитронных пар сильным полем и парадокс Клейна.

В двумерных дираковских материалах плотность заряда, индуцированная кулоновским полем, а также непертурбативные эффекты исследовались в работах [19, 20]. Мы рассматриваем плотность заряда  $\rho_{ind}(\mathbf{r})$ , индуцированного аксиально-симметричной потенциальной ямой глубины  $U$  с характерным радиусом  $R$ . Мы вычисляем функцию  $\rho_{ind}(\mathbf{r})$  аналитически на расстояниях  $r \gg R$  при различных значениях ширины запрещенной зоны и глубины потенциала. Для вычисления асимптотики мы используем метод функции Грина для электрона во внешнем поле, развитый в работе [21]. Мы показываем, что в широкой области изменений параметров потенциала плотность индуцированного заряда можно представить в виде  $\rho_{ind}(\mathbf{r}) = F(r)\mathcal{L}_V$ , где коэффициент  $\mathcal{L}_V$  зависит от конкретного вида потен-

\* E-mail: iterekhov@yandex.ru

циала и не зависит от расстояния  $r$ , а функция  $F(r)$  не зависит от потенциала.

Статья имеет следующую структуру: в разд. 2 мы приводим общее выражение для плотности индуцированного заряда; в разд. 3 исследуем уравнение для функции Грина; в разд. 4 рассматриваем волновые функции и поведение уровней энергии для связанных состояний электрона в потенциальной яме; в разд. 5 вычисляем асимптотику плотности индуцированного заряда. В Заключении обсуждаем полученные результаты.

## 2. ОБЩЕЕ РАССМОТРЕНИЕ

Плотность заряда, индуцированного потенциалом  $V(r)$ , можно представить в виде контурного интеграла от функции Грина электрона:

$$\rho_{ind}(\mathbf{r}) = -ieN \int_C \frac{d\epsilon}{2\pi} \text{Tr}\{G(\mathbf{r}, \mathbf{r}|\epsilon)\}, \quad (1)$$

где  $e$  — заряд электрона, коэффициент  $N = 4$  связан с вырождением по спину электрона и по количеству долин в ДПМ, функция Грина  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'|\epsilon)$  удовлетворяет следующему уравнению [18]:

$$[\epsilon - V(r) - v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} - \Delta \sigma_z] G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'|\epsilon) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (2)$$

Здесь  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ ,  $\sigma_a$  — матрицы Паули,  $\mathbf{p} = -i\hbar(\partial/\partial x, \partial/\partial y)$  — оператор импульса,  $\Delta$  — половина ширины запрещенной зоны,  $v_F$  — постоянная размерности скорости. Сигма-матрицы отвечают псевдоспиновым степеням свободы. В уравнении (2) опущено слагаемое, отвечающее спин-орбитальному взаимодействию, поскольку константу спин-орбитального взаимодействия можно считать малой [18]. Мы рассматриваем потенциалы  $V(r)$ , достаточно быстро убывающие на расстояниях  $R$ , т.е.  $V(r) \approx 0$  при  $r \gg R$ . Ниже мы полагаем  $\hbar = v_F = 1$ . Функция Грина электрона, находящегося в поле потенциальной ямы, имеет разрывы и полюсы, отвечающие состояниям непрерывного спектра и связанным состояниям электрона соответственно. На рис. 1 схематично изображены разрывы и полюсы. Разрывы изображены толстыми линиями, полюсы — крестиками. Разрывы расположены на действительной оси и находятся в интервалах  $(-\infty, -\Delta]$  и  $[\Delta, \infty)$ . Полюсы лежат в интервале  $(-\Delta, \Delta)$ . Контур интегрирования  $C$  проходит ниже действительной оси в левой полуплоскости, пересекает действительную ось между левым разрывом функции Грина и полюсом, который отвечает

связанному состоянию с минимальной энергией, затем контур проходит выше действительной оси, см. рис. 1. Такой выбор контура интегрирования означает, что все состояния с энергиями  $\epsilon \leq -\Delta$  заняты. Используя аналитические свойства функции Грина,

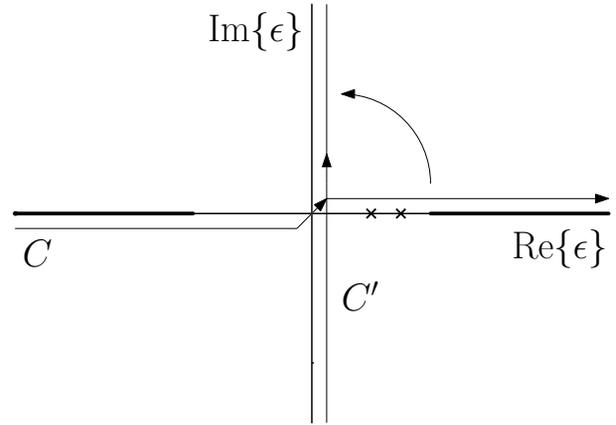


Рис. 1. Аналитические свойства функции Грина по переменной  $\epsilon$  и контуры интегрирования. Разрывы и полюсы изображены толстыми линиями и крестиками соответственно

мы деформируем контур интегрирования по  $\epsilon$  так, чтобы он совпадал с мнимой осью, выполняем замену переменных  $\epsilon \rightarrow i\epsilon$  и получаем

$$\rho_{ind}(\mathbf{r}) = \tilde{\rho}(\mathbf{r}) - eN \sum_{\epsilon_n < 0} |\psi_n(\mathbf{r})|^2, \quad (3)$$

где

$$\tilde{\rho}(\mathbf{r}) = eN \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} \text{Tr}\{G(\mathbf{r}, \mathbf{r}|i\epsilon)\}, \quad (4)$$

$\psi_n(\mathbf{r})$  — волновая функция электрона, имеющего энергию  $\epsilon_n < 0$ . Поэтому для вычисления плотности индуцированного заряда необходимо найти функцию Грина и волновые функции связанных состояний.

Для вычисления асимптотики плотности индуцированного заряда на расстояниях  $r \gg R$  удобно представить уравнение для функции Грина в следующем виде [21]:

$$G(r, r'|i\epsilon) = G^{(0)}(r, r'|i\epsilon) + \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 G^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1|i\epsilon) [V(r_1)\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + V(r_1)G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2|i\epsilon)V(r_2)] G^{(0)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'|i\epsilon), \quad (5)$$

где  $G^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'|i\epsilon)$  — решение уравнения (2) при  $V(r) = 0$ . В уравнении (5) масштабы расстояний  $r$  и  $R$  разделились, поскольку в правой части

уравнения от  $r$  зависит только функция  $G^{(0)}$ , а аргументы  $\mathbf{r}_1$  и  $\mathbf{r}_2$  функции  $G$  локализованы на масштабе  $R$ , т.е.  $r_{1,2} \sim R$ , поскольку потенциал отличен от нуля на масштабе  $R$ . Такое разделение масштабов позволяет вычислить асимптотику плотности индуцированного заряда [21].

Используя выражения (4) и (5), мы представляем функцию  $\tilde{\rho}(\mathbf{r})$  в виде

$$\tilde{\rho}(\mathbf{r}) = \tilde{\rho}^{(1)}(\mathbf{r}) + \tilde{\rho}^{(2)}(\mathbf{r}). \quad (6)$$

Здесь  $\tilde{\rho}^{(1)}(\mathbf{r})$  — линейный по потенциалу  $V(r)$  вклад,  $\tilde{\rho}^{(2)}(\mathbf{r})$  — вклад более высоких по потенциалу порядков:

$$\tilde{\rho}^{(1)}(\mathbf{r}) = eN \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} \int d\mathbf{r}_1 \text{Tr} \left\{ G^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1 | i\epsilon) V(r_1) \times \right. \\ \left. \times G^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r} | i\epsilon) \right\}, \quad (7)$$

$$\tilde{\rho}^{(2)}(\mathbf{r}) = eN \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \text{Tr} \left\{ G^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1 | i\epsilon) \times \right. \\ \left. \times V(r_1) G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | i\epsilon) V(r_2) G^{(0)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r} | i\epsilon) \right\}. \quad (8)$$

Таким образом, необходимо вычислить функции  $G^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}' | i\epsilon)$  и  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}' | i\epsilon)$ .

### 3. ФУНКЦИЯ ГРИНА ЭЛЕКТРОНА В ПОЛЕ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЫ

Решая уравнение (2) при нулевом потенциале, получаем

$$G^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}' | i\epsilon) = -\frac{i}{2\pi} \left[ (\epsilon - i\sigma_z \Delta) K_0(\kappa\rho) + \right. \\ \left. + \kappa \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\rho}}{\rho} K_1(\kappa\rho) \right], \quad (9)$$

где  $\boldsymbol{\rho} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$ ,  $\kappa = \sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}$ ,  $K_a(b)$  — функция Макдональда.

Для азимутально-симметричного потенциала удобно представить функцию Грина в следующем виде:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}' | \epsilon) = \frac{1}{2\pi} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{im(\phi-\phi')} \times \\ \times \begin{pmatrix} \mathcal{A}_m^{(\Delta)}(r, r' | \epsilon) & -ie^{-i\phi'} \mathcal{B}_m^{(\Delta)}(r, r' | \epsilon) \\ ie^{i\phi} \mathcal{C}_m^{(\Delta)}(r, r' | \epsilon) & e^{i(\phi-\phi')} \mathcal{D}_m^{(\Delta)}(r, r' | \epsilon) \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Подставляя данное представление в уравнение (2) и учитывая следующее представление для  $\delta$ -функции:

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{\delta(r - r')}{2\pi\sqrt{rr'}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{im(\phi-\phi')}, \quad (11)$$

получаем уравнения

$$(\epsilon - V(r) - \Delta) \mathcal{A}_m^{(\Delta)} - \frac{\partial \mathcal{C}_m^{(\Delta)}}{\partial r} - \frac{m+1}{r} \mathcal{C}_m^{(\Delta)} = \frac{\delta(r - r')}{\sqrt{rr'}},$$

$$(\epsilon - V(r) + \Delta) \mathcal{C}_m^{(\Delta)} + \frac{\partial \mathcal{A}_m^{(\Delta)}}{\partial r} - \frac{m}{r} \mathcal{A}_m^{(\Delta)} = 0. \quad (12)$$

Функции  $\mathcal{D}_m^{(\Delta)}$  и  $\mathcal{B}_m^{(\Delta)}$  выражаются через функции  $\mathcal{A}_m^{(\Delta)}$  и  $\mathcal{C}_m^{(\Delta)}$  следующим образом:

$$\mathcal{D}_m^{(\Delta)} = \mathcal{A}_{-m-1}^{(-\Delta)}, \quad \mathcal{B}_m^{(\Delta)} = -\mathcal{C}_{-m-1}^{(-\Delta)}. \quad (13)$$

Поэтому для вычисления функции Грина необходимо решить два уравнения (12).

### 4. ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ ЭЛЕКТРОНА В ПОЛЕ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЫ

Для нахождения индуцированного заряда необходимо знать волновую функцию электрона  $\psi_n(\mathbf{r})$  в потенциале, см. (3). Уравнение для волновой функции имеет вид [18]

$$[\epsilon - V(r) - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} - \Delta\sigma_z] \psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (14)$$

Явный вид волновой функции и спектр зависят от конкретного вида потенциала. Рассмотрим подробно решения в случае потенциальной ямы вида

$$V(r) = -U\theta(R - r), \quad (15)$$

где  $\theta(x)$  — функция Хевисайда,  $R$  и  $U$  — радиус и глубина потенциальной ямы. Волновые функции в таком потенциале хорошо исследованы [22]. Подставляя волновую функцию в виде

$$\psi_n(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} u_n(r) \\ id_n(r)e^{i\phi} \end{pmatrix} e^{im\phi} \quad (16)$$

в уравнение (14) и решая его, находим [22]

$$u_n(r) = h \begin{cases} J_{|m|}(\mu_n r), & r < R, \\ gK_{|m|}(\tilde{\mu}_n r), & r > R, \end{cases} \quad (17)$$

$$d_n(r) = h \begin{cases} \frac{\sigma \mu_n}{\epsilon_n + U + \Delta} J_{|m|+\sigma}(\mu_n r), & r < R, \\ \frac{g \tilde{\mu}_n}{\epsilon_n + \Delta} K_{|m|+\sigma}(\tilde{\mu}_n r), & r > R, \end{cases} \quad (18)$$

где  $\sigma = 1$  при  $m \geq 0$  и  $\sigma = -1$  при  $m < 0$ ,  $\epsilon_n$  — энергия связанного состояния,  $\mu_n = \sqrt{(\epsilon_n + U)^2 - \Delta^2}$ ,  $\tilde{\mu}_n = \sqrt{\Delta^2 - \epsilon_n^2}$ ,  $J_a(b)$  — функция Бесселя. Энергия  $\epsilon_n$  зависит от  $m$ . Коэффициенты  $g$  и  $h$  могут быть найдены из условия непрерывности функций  $u_n(r)$  и  $d_n(r)$  в точке  $r = R$  и условия нормировки волновой функции [22]:

$$g = \frac{J_{|m|}(\mu_n R)}{K_{|m|}(\tilde{\mu}_n R)}, \quad (19)$$

$$h^2 = \frac{\epsilon_n + U + \Delta}{2\pi UR^2} \left( \frac{\Delta J_m^2(\mu_n R)}{\Delta + \epsilon_n} + \frac{\Delta J_{m+1}^2(\mu_n R)}{\Delta - \epsilon_n} + \frac{\Delta(U + 2\epsilon_n) - (2m + 1)(\Delta^2 + \epsilon_n(U + \epsilon_n))}{R\mu_n \tilde{\mu}_n^2} \times \right. \\ \left. \times J_m(\mu_n R) J_{m+1}(\mu_n R) \right)^{-1}. \quad (20)$$

Условие непрерывности функций приводит к уравнению для энергий  $\epsilon_n$  связанных состояний:

$$\frac{\sigma \mu_n (\epsilon_n + \Delta)}{\tilde{\mu}_n (\epsilon_n + U + \Delta)} \frac{J_{|m|+\sigma}(\mu_n R)}{J_{|m|}(\mu_n R)} = \frac{K_{|m|+\sigma}(\tilde{\mu}_n R)}{K_{|m|}(\tilde{\mu}_n R)}. \quad (21)$$

Можно проверить, что каждый уровень энергии  $\epsilon_n$  плавно уменьшается от  $\Delta$  до  $-\Delta$  при увеличении  $U$  от нуля до некоторого критического значения глубины потенциала  $U_c$ , при котором уровень энергии достигает значения  $-\Delta$  и исчезает из дискретного спектра. При таком значении потенциала возникают процессы рождения пар электрон–дырка (аналог рождения электрон-позитронных пар в квантовой электродинамике) [22, 23]. В качестве примера на рис. 2 изображена зависимость энергии низшего связанного состояния от глубины потенциала при  $R\Delta = 1$ . Значение критической глубины потенциала  $U_c$  разное для разных уровней энергии. Минимальное значение  $U_c$  соответствует исчезновению низшего связанного состояния. При критическом значении потенциала возникают особенности плотности индуцированного заряда [17].

Для вычисления плотности индуцированного заряда необходимо вычислить значения глубины потенциала  $U_0$ , при которых энергии связанных состояний становятся равными нулю, см. (3). Для исследования поведения индуцированного заряда вблизи критического значения глубины потенциала необходимо также вычислить значение  $U_c$ .

Величины  $U_0$  и  $U_c$  могут быть найдены численно для произвольных значений  $\Delta$  и  $R$ . Для этого численно решается уравнение (21) при  $\epsilon_n = 0$  и  $\epsilon_n = -\Delta$  соответственно. Однако в случае, когда параметры  $R$  и  $\Delta$  удовлетворяют соотношениям  $R\Delta \ll 1$  или  $R\Delta \gg 1$ , значения  $U_0$  и  $U_c$  находятся аналитически. Так, полагая  $\epsilon_0 = 0$  в уравнении (21), находим решения в главном и следующем за главным порядках по параметрам малости. При  $R\Delta \ll 1$  получаем

$$U_0 \approx \frac{g_c}{R} - \Delta \ln \frac{1}{R\Delta}. \quad (22)$$

При  $R\Delta \gg 1$  находим

$$U_0 \approx \Delta + \frac{g_c^2}{2R^2\Delta}, \quad (23)$$

где  $g_c$  — наименьшее положительное решение уравнения  $J_0(g_c) = 0$  ( $g_c \approx 2.4$ ). Полагая  $\epsilon_0 = -\Delta$  в уравнении (21), для  $U_c$  получаем выражение

$$\frac{U_c}{\Delta} = 1 + \sqrt{1 + \frac{g_c^2}{R^2\Delta^2}}, \quad (24)$$

которое в предельных случаях параметра  $R\Delta$  принимает вид

$$U_c \approx \frac{g_c}{R} + \Delta \quad (25)$$

при  $R\Delta \ll 1$  и

$$U_c \approx 2\Delta + \frac{g_c^2}{2R^2\Delta} \quad (26)$$

при  $R\Delta \gg 1$ . Отметим, что в случае  $R\Delta \ll 1$  значения  $U_0$  и  $U_c$  совпадают в главном приближении по малому параметру, т. е.

$$U_0 \approx U_c. \quad (27)$$

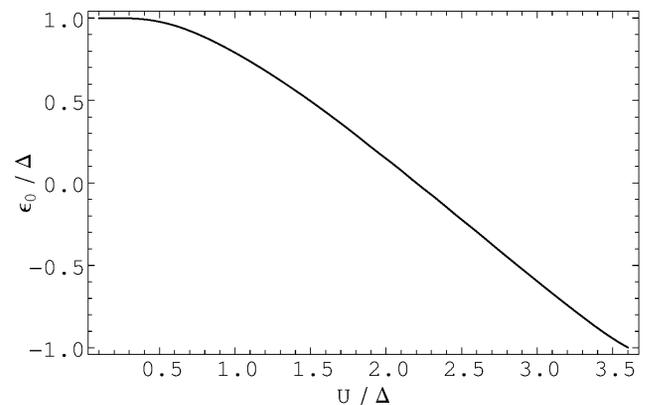


Рис. 2. Зависимость отношения  $\epsilon_0/\Delta$  от  $U/\Delta$  при  $R\Delta = 1$

### 5. АСИМПТОТИКА ПЛОТНОСТИ ИНДУЦИРОВАННОГО ЗАРЯДА

Асимптотика плотности индуцированного заряда зависит от соотношений между расстоянием  $r$ , характерной шириной  $R$  потенциальной ямы  $V(r)$  и комптоновской длиной волны электрона  $1/\Delta$ . Мы рассмотрим два случая. Первый случай:  $R \ll r \ll \Delta^{-1}$ . Во втором случае  $r \gg R$  и  $r \gg \Delta^{-1}$ , а соотношение между  $R$  и  $\Delta$  произвольно. В первом случае ( $R \ll r \ll \Delta^{-1}$ ) при вычислении асимптотики индуцированного заряда в интеграл по энергии  $\epsilon$  основной вклад дают масштабы  $\epsilon \sim 1/r$ . При таких энергиях можно пренебречь величиной ширины запрещенной зоны, поскольку  $r\Delta \ll 1$ . Поэтому результат для асимптотики плотности индуцированного заряда  $\rho_{ind}(\mathbf{r})$  будет совпадать с результатом работы [17], где исследовался индуцированный заряд в графене. Ниже мы подробно рассмотрим второй случай.

Для вычисления  $\tilde{\rho}^{(1)}(\mathbf{r})$  на расстояниях  $r \gg R$ , подставляем функцию Грина (9) в выражение (7) и получаем

$$\tilde{\rho}^{(1)}(\mathbf{r}) = -\frac{eN}{2\pi^3} \int_0^\infty d\epsilon \int d\mathbf{r}' V(r') \{ (\epsilon^2 - \Delta^2) K_0^2(\kappa\rho) - \kappa^2 K_1^2(\kappa\rho) \}, \quad (28)$$

где  $\rho = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ . Интеграл по переменной  $r'$  сходится на масштабе локализации потенциала  $R$ . Поскольку  $r \gg R$  и  $r \gg \Delta^{-1}$ , аргумент функции Макдональда  $\kappa\rho \gg 1$ . Подставляя асимптотику функции Макдональда для больших аргументов [24],

$$K_m(x) \approx \sqrt{\frac{\pi}{2x}} e^{-x}, \quad (29)$$

в выражение (28), используя метод Лапласа, вычисляем интеграл по  $\epsilon$ . Результат имеет вид

$$\tilde{\rho}^{(1)}(\mathbf{r}) = \frac{eN}{2\sqrt{\pi}} \left( \frac{\Delta}{r} \right)^{3/2} \int \frac{d\mathbf{r}'}{2\pi} V(r') e^{-2\rho\Delta}. \quad (30)$$

Ниже мы предполагаем также, что выполнено следующее соотношение:

$$\frac{R^2\Delta}{r} \ll 1. \quad (31)$$

В этом случае мы интегрируем по направлению вектора  $\mathbf{r}'$ , и получаем

$$\tilde{\rho}^{(1)}(\mathbf{r}) = F(r) \mathcal{L}_V^{(1)}, \quad (32)$$

где

$$F(r) = -\frac{eN\sqrt{\Delta}e^{-2r\Delta}}{2\sqrt{\pi}r^{3/2}}, \quad (33)$$

$$\mathcal{L}_V^{(1)} = -\Delta \int_0^\infty dr' r' V(r') I_0(2r'\Delta), \quad (34)$$

$I_m(x)$  — модифицированная функция Бесселя первого рода. Видно, что линейный по потенциалу вклад в плотность индуцированного заряда убывает экспоненциально на больших расстояниях.

Для вычисления асимптотики  $\tilde{\rho}^{(2)}(\mathbf{r})$  подставляем функции Грина в виде (9) и (10) в выражение (8), затем полагаем  $r_1 = 0$  и  $r_2 = 0$  в аргументах функций  $G^{(0)}$ , используем асимптотику функции Макдональда (29), интегрируем по направлениям векторов  $\mathbf{r}_1$  и  $\mathbf{r}_2$ , учитываем условие (31), используем соотношения (13) и получаем

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}^{(2)}(\mathbf{r}) = & \frac{eN\Delta}{2r} \int_{-\infty}^\infty \frac{d\epsilon}{2\pi} e^{-2\kappa r} \int_0^\infty \int_0^\infty dr_1 dr_2 r_1 r_2 V(r_1) V(r_2) \times \\ & \times \sum_{s=-1,1} \sum_{m=-\infty}^\infty I_m(\kappa r_2) \left\{ I_m(\kappa r_1) \mathcal{A}_m^{(s\Delta)}(r_1, r_2 | i\epsilon) - \right. \\ & \left. - s I_{m+1}(\kappa r_1) \mathcal{C}_m^{(s\Delta)}(r_1, r_2 | i\epsilon) \right\}. \quad (35) \end{aligned}$$

Здесь  $\mathcal{A}_m^{(\pm\Delta)}(r_1, r_2 | i\epsilon)$  и  $\mathcal{C}_m^{(\pm\Delta)}(r_1, r_2 | i\epsilon)$  — решения системы уравнений (12).

Следуя результатам работы [17], вводим функции

$$a_m^{(\pm\Delta)}(r, i\epsilon) = \int_0^\infty dr' r' V(r') I_m(\kappa r') \mathcal{A}_m^{(\pm\Delta)}(r, r' | i\epsilon), \quad (36)$$

$$c_m^{(\pm\Delta)}(r, i\epsilon) = \int_0^\infty dr' r' V(r') I_m(\kappa r') \mathcal{C}_m^{(\pm\Delta)}(r, r' | i\epsilon), \quad (37)$$

которые удовлетворяют следующим уравнениям:

$$\begin{aligned} & \left( \frac{\partial}{\partial r} - \frac{m}{r} \right) a_m^{(\pm\Delta)}(r, i\epsilon) + \\ & + (i\epsilon - V(r) \pm \Delta) c_m^{(\pm\Delta)}(r, i\epsilon) = 0, \\ & (i\epsilon - V(r) \mp \Delta) a_m^{(\pm\Delta)}(r, i\epsilon) - \\ & - \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{m+1}{r} \right) c_m^{(\pm\Delta)}(r, i\epsilon) = V(r) I_m(\kappa r). \end{aligned} \quad (38)$$

Для получения этих уравнений мы умножили обе части уравнения (12) на  $r' V(r') I_m(\kappa r')$  и проинте-

гировали по  $r'$ . Граничные условия для функций имеют вид

$$a_m^{(\pm\Delta)}(0, i\epsilon) < \infty, c_m^{(\pm\Delta)}(0, i\epsilon) < \infty, \lim_{r \rightarrow \infty} a_m^{(\pm\Delta)}(r, i\epsilon) = \lim_{r \rightarrow \infty} c_m^{(\pm\Delta)}(r, i\epsilon) = 0. \quad (39)$$

Выражая  $\tilde{\rho}^{(2)}(\mathbf{r})$  через  $a_m^{(\pm\Delta)}(r, i\epsilon)$  и  $c_m^{(\pm\Delta)}(r, i\epsilon)$ , получаем

$$\tilde{\rho}^{(2)}(\mathbf{r}) = \frac{eN\Delta}{2r} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} e^{-2\kappa r} \int_0^{\infty} dr_1 r_1 V(r_1) \times \sum_{s=-1,1} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left\{ I_m(\kappa r_1) a_m^{(s\Delta)}(r_1, i\epsilon) - s I_{m+1}(\kappa r_1) c_m^{(s\Delta)}(r_1, i\epsilon) \right\}. \quad (40)$$

Таким образом, для вычисления функции  $\rho_{ind}^{(2)}(\mathbf{r})$  необходимо найти функции  $a_m^{(\Delta)}(r, i\epsilon)$  и  $c_m^{(\Delta)}(r, i\epsilon)$ .

Предположим, что функции  $a_m^{(\Delta)}(r, i\epsilon)$  и  $c_m^{(\Delta)}(r, i\epsilon)$  не имеют особенностей при малых  $\epsilon$ , тогда интеграл по энергии можно вычислить, используя метод Лапласа:

$$\tilde{\rho}^{(2)}(\mathbf{r}) = F(r) \mathcal{L}_V^{(2)}, \quad (41)$$

где

$$\mathcal{L}_V^{(2)} = -\frac{\Delta}{2} \sum_{s=-1,1} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} dr_1 r_1 V(r_1) \left\{ I_m(\kappa r_1) \times a_m^{(s\Delta)}(r_1, 0) - s I_{m+1}(\kappa r_1) c_m^{(s\Delta)}(r_1, 0) \right\}. \quad (42)$$

Видно, что зависимость от расстояний и зависимость от потенциала факторизовались. Ниже, на примере конкретного вида потенциала, мы покажем, что пренебрежение зависимостью от энергии в функциях  $a_m^{(\Delta)}(r, i\epsilon)$  и  $c_m^{(\Delta)}(r, i\epsilon)$  оправдано для широкой области изменения параметров потенциала. Однако выражение (41) не верно при значениях потенциала  $U$ , близких  $U_0$ , т. е. таких, что полюс функции Грина, отвечающий связанному состоянию, расположен близко к контуру интегрирования. В этом случае вычисление по переменной  $\epsilon$  необходимо выполнять аккуратнее, поскольку функции  $a_m^{(\Delta)}(r, i\epsilon)$  и  $c_m^{(\Delta)}(r, i\epsilon)$  содержат особенность, см. ниже.

Явный вид функций  $a_m^{(\Delta)}(r, i\epsilon)$  и  $c_m^{(\Delta)}(r, i\epsilon)$  зависит от вида потенциала  $V(r)$ , поэтому далее мы исследуем плотность заряда, индуцированного потен-

циалом (15). Решения уравнений (38) для потенциала (15) имеют вид

$$a_m^{(\pm\Delta)}(r, i\epsilon) = \begin{cases} H_m^{(\pm)} J_{|m|}(\kappa r) - \frac{U \pm \Delta + i\epsilon}{U + 2i\epsilon} I_m(\kappa r), & r < R, \\ G_m^{(\pm)} K_m(\kappa r), & r > R, \end{cases} \quad (43)$$

$$c_m^{(\pm\Delta)}(r, i\epsilon) = \begin{cases} -\frac{\kappa \sigma H_m^{(\pm)} J_{|m|+\sigma}(\kappa r)}{U \pm \Delta + i\epsilon} + \frac{\kappa I_{|m|+\sigma}(\kappa r)}{U + 2i\epsilon}, & r < R, \\ \frac{\kappa}{i\epsilon \pm \Delta} G_m^{(\pm)} K_{|m|+\sigma}(\kappa r), & r > R, \end{cases} \quad (44)$$

где  $\kappa = \sqrt{(U - i\epsilon)^2 - \Delta^2}$ . Коэффициенты  $H_m^{(\pm)}$  и  $G_m^{(\pm)}$  могут быть найдены из условий непрерывности функций  $a_m^{(\pm\Delta)}(r, i\epsilon)$  и  $c_m^{(\pm\Delta)}(r, i\epsilon)$  в точке  $r = R$ . Мы не приводим явного вида коэффициентов в силу их громоздкости.

Подставляя выражения (43) и (44) в (40), выполняя простые преобразования и интегрирование по переменной  $r_1$ , получаем следующее выражение:

$$\tilde{\rho}^{(2)}(\mathbf{r}) = \frac{eNUR\Delta}{2r} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} \frac{U + i\epsilon}{(U + 2i\epsilon)\kappa} e^{-2\kappa r} I_1(2\kappa R) - \frac{eN\Delta}{r} \sum_{m=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} \frac{e^{-2\kappa r} (M_m \gamma_m + P_m \gamma_{m+1})}{\kappa R (U + 2i\epsilon)^2 D_m}, \quad (45)$$

где

$$\gamma_m = y I_{m+1}(y) J_m(x) + x I_m(y) J_{m+1}(x), \quad (46)$$

$$M_m = \tilde{B}_m \left( \kappa [(U + i\epsilon)\kappa - U\Delta] + U y [(\kappa^2 - i\epsilon U) A_m + \kappa \Delta \tilde{A}_m] \right) + \kappa \left( i\epsilon \kappa + U y [\kappa A_m + \Delta \tilde{A}_m] \right) B_m, \quad (47)$$

$$P_m = B_m \left( \kappa [(U + i\epsilon)\kappa - U\Delta] + U y [(\kappa^2 - i\epsilon U) \tilde{A}_m + \kappa \Delta A_m] \right) - \kappa \left( i\epsilon \kappa + U y [\kappa \tilde{A}_m + \Delta A_m] \right) \tilde{B}_m, \quad (48)$$

$$D_m = \kappa \kappa \left( B_m^2 - \tilde{B}_m^2 \right) + 2 B_m \tilde{B}_m (\kappa^2 - i\epsilon U), \quad (49)$$

$$A_m = I_m(y) K_{m+1}(y), \quad \tilde{A}_m = I_{m+1}(y) K_m(y), \quad (50)$$

$$B_m = J_m(x) K_{m+1}(y), \quad \tilde{B}_m = J_{m+1}(x) K_m(y), \quad (51)$$

$x = \kappa R$ ,  $y = \kappa R$ . В первом слагаемом в правой части (45) вычисляем интеграл методом Лапласа,

предполагая, что  $r \gg R$  и  $r \gg 1/\Delta$ , складываем полученный результат для  $\tilde{\rho}^{(2)}(\mathbf{r})$  с функцией  $\tilde{\rho}^{(1)}(\mathbf{r})$ , см. (32), вычисленной для потенциала (15), и получаем

$$\tilde{\rho}(\mathbf{r}) = -\frac{eN\Delta}{Rr} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} \frac{e^{-2\kappa r}}{\kappa(U + 2i\epsilon)^2} \times \sum_{m=0}^{\infty} \frac{M_m \gamma_m + P_m \gamma_{m+1}}{D_m}. \quad (52)$$

Исследуем зависимость функции  $\tilde{\rho}(\mathbf{r})$  от глубины потенциальной ямы.

При  $r \gg 1/\Delta$  экспонента  $e^{-2\kappa r}$  изменяется на масштабе  $\epsilon \sim \Delta/\sqrt{r\Delta}$ , т.е. при  $\epsilon \ll \Delta$ . Предполагая, что величины  $D_m$  не имеют особенностей при малых  $\epsilon$ , вычисляем интеграл и получаем

$$\tilde{\rho}(\mathbf{r}) = F(r)\mathcal{L}_V, \quad (53)$$

где

$$\mathcal{L}_V = \frac{U}{\Delta} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{J_m(x)J_{m+1}(x)}{x(B_m^2 - \tilde{B}_m^2) + 2yB_m\tilde{B}_m} \Big|_{\epsilon=0}. \quad (54)$$

Таким образом, функция  $\tilde{\rho}(\mathbf{r})$  является произведением функции от  $r$  и коэффициента  $\mathcal{L}_V$ , который зависит от параметров потенциала и не зависит от  $r$ .

При малой глубине потенциала, т.е. при  $U \ll \Delta$ , получаем

$$\mathcal{L}_V = \frac{UR I_1(2R\Delta)}{2}. \quad (55)$$

Этот результат согласуется с вкладом  $\tilde{\rho}^{(1)}$  (34) для потенциала (15). Знаменатель в выражении (54) обращается в нуль при значениях потенциала  $U = U_0$ , которые удовлетворяют уравнению (21) при  $\epsilon_n = 0$ . Поэтому при  $U = U_0$  функция  $\mathcal{L}_V$  имеет особенность. Для того чтобы правильно вычислить функцию  $\tilde{\rho}(\mathbf{r})$  (52) при значениях  $U$ , близких к  $U_0$ , мы выделяем зависимость знаменателя  $D_m$  при малых значениях  $\epsilon$ . Для этого раскладываем знаменатель  $D_m$  по энергии, удерживаем члены до линейного по  $\epsilon$  порядка включительно и получаем следующее выражение:

$$\tilde{\rho}(\mathbf{r}) = -\frac{eNU}{Rr} \sum_{m=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} \frac{J_m(x_0) J_{m+1}(x_0) e^{-2\kappa r}}{\beta_m + i\epsilon\alpha_m} \quad (56)$$

где  $x_0 = R\sqrt{U^2 - \Delta^2}$ ,  $\beta_m = D_m|_{\epsilon=0}$ ,

$$\alpha_m = -\frac{2U^2 R \Delta}{\sqrt{U^2 - \Delta^2}} K_m(R\Delta) K_{m+1}(R\Delta) \times$$

$$\times \left( J_m^2(x_0) + J_{m+1}^2(x_0) + \frac{U - (2m + 1)\Delta}{x_0\Delta} J_m(x_0) J_{m+1}(x_0) \right). \quad (57)$$

Исследуем поведение одного из членов суммы выражения (56) при изменении  $U$ . Рассмотрим, например, слагаемое с  $m = 0$ . Для удобства обозначим его как  $\tilde{\rho}_0(\mathbf{r})$ . Интеграл по энергии содержит большой параметр  $r\Delta$  в экспоненте, параметр  $\beta_0$  в знаменателе, который при  $U$ , близких к  $U_0$ , становится малым. Из них можно построить безразмерный параметр  $\lambda = r|\beta_0/\alpha_0|$ . Если  $\lambda \gg 1$ , то в знаменателе можно положить  $\epsilon = 0$ , поскольку сходимость интеграла определяется экспонентой, а интеграл сходится на масштабах  $\epsilon \sim \Delta/\sqrt{r\Delta}$ . В этом случае ответ для данного слагаемого совпадает с полученным ранее. Если же параметр  $\lambda \ll 1$ , то сходимость интеграла определяется знаменателем, поэтому мы пренебрегаем зависимостью экспоненты от энергии. Вычисляя интеграл, находим

$$\tilde{\rho}_0(\mathbf{r}) = -\frac{eN}{Rr} e^{-2r\Delta} \frac{\text{sign}(U_0 - U) J_0(x_0) J_1(x_0)}{2|\alpha_0|}. \quad (58)$$

Отметим, что при  $\lambda \ll 1$  зависимость функции  $\tilde{\rho}_0(\mathbf{r})$  от  $r$  отличается от ее поведения при  $\lambda \gg 1$ . Однако при фиксированном значении  $U$ , отличном от  $U_0$ , т.е. при фиксированном  $\beta_0/\alpha_0$ , всегда можно найти достаточно большую величину  $r$ , такую что справедлива асимптотика (52), которая верна при  $\lambda \gg 1$ . Несмотря на то, что функция  $\tilde{\rho}_0(\mathbf{r})$  меняется скачком при  $U = U_0$ ,

$$\tilde{\rho}_0(\mathbf{r})|_{U=U_0-0} = -\tilde{\rho}_0(\mathbf{r})|_{U=U_0+0},$$

плотность индуцированного заряда при  $U = U_0$  никаких особенностей не имеет, поскольку в случае, когда полюс функции Грина оказывается в левой полуплоскости, мы должны прибавить вклад этого полюса к функции  $\tilde{\rho}(\mathbf{r})$ , см. (3). Подставляя выражения (17)–(20) в (16) и полагая  $m = 0$ ,  $\epsilon_0 = 0$ , получаем вклад полюса при  $U = U_0 + 0$ :

$$-eN|\psi_0(\mathbf{r})|^2 \Big|_{\epsilon=0} = 2\tilde{\rho}(\mathbf{r}) \text{sign}(U_0 - U). \quad (59)$$

Таким образом, плотность индуцированного заряда непрерывна при  $U = U_0$ .

При значениях глубины потенциала, близких к  $U_c$ , т. е. в случае, когда энергия основного состояния близка к  $-\Delta$ , функция  $\tilde{\rho}(\mathbf{r})$  убывает как  $e^{-2r\Delta}/r^{3/2}$ , см. (53), тогда как квадрат волновой функции убывает как  $h^2 g^2 K_1^2(r\sqrt{\Delta^2 - \epsilon^2})$ , см. (17), (18). Это означает, что на больших расстояниях  $r\sqrt{\delta\epsilon\Delta} \gg 1$  вклад волновой функции, отвечающей состоянию с энергией  $\epsilon = -\Delta + \delta\epsilon$ , в плотность индуцированного заряда является главным. Здесь  $\delta\epsilon \ll \Delta$ . Однако коэффициент  $h^2 g^2$  стремится к нулю при приближении уровня энергии к валентной зоне ( $\delta\epsilon \rightarrow 0$ ). Поэтому существует область расстояний, в которой  $|\tilde{\rho}(\mathbf{r})| \gg |e|\psi_0(r)|^2$ . Предполагая  $\delta\epsilon$  достаточно малым, получаем условие на эту область:

$$\max(\Delta^{-1}, R) \ll r \ll r_*, \quad (60)$$

$$r_* = \frac{1}{\Delta} \ln \left| \frac{R^3 \Delta^3}{\sqrt{r\delta\epsilon}} \ln^2(R\sqrt{\delta\epsilon\Delta}) \right|. \quad (61)$$

На таких расстояниях плотность индуцированного заряда совпадает с функцией  $\tilde{\rho}(\mathbf{r})$ , т. е.  $\rho_{ind}(\mathbf{r}) = \tilde{\rho}(\mathbf{r})$ . При  $r \gtrsim r_*$  поведение плотности индуцированного заряда определяется поведением волновой функции, поэтому  $\rho_{ind}(\mathbf{r})$  убывает как  $\exp\{-2r\sqrt{2\delta\epsilon\Delta}\}$ . При  $U = U_c$  связанное состояние исчезает из дискретного спектра. Это приводит к скачку плотности индуцированного заряда при  $U = U_c$ :

$$\rho_{ind}(\mathbf{r})|_{U=U_c+0} - \rho_{ind}(\mathbf{r})|_{U=U_c-0} = eN|\psi_0(\mathbf{r})|^2. \quad (62)$$

При  $U = U_c + 0$  происходит процесс рождения пар электрон-дырка. Электроны локализуются на масштабах, много меньших, чем  $r$ , а дырки утекают на бесконечность. Поэтому полный индуцированный заряд становится отличным от нуля и равным  $eN$ , см. [17, 23].

Рассмотрим поведение плотности индуцированного заряда в случае  $R\Delta \ll 1$ . При  $U < \Delta$  подставляем в (54) асимптотику функции Макдональда для малых аргументов,

$$K_m(y) \approx -\ln(y)\delta_{m,0} + (1 - \delta_{m,0}) \frac{2^{m-1}\Gamma(m)}{y^m}, \quad (63)$$

где  $\Gamma(x)$  — гамма-функция Эйлера, используем аналитическое продолжением функции Бесселя и получаем

$$\mathcal{L}_V \approx UR^2\Delta/2. \quad (64)$$

Основной вклад в  $\mathcal{L}_V$  дает слагаемое с  $m = 0$ , остальные слагаемые подавлены степенями параметра  $R\Delta$ . Подставляя (64) и (33) в (53), получаем

$$\tilde{\rho}_{ind}(\mathbf{r}) = -\frac{eNUR^2 e^{-2r\Delta}}{4\sqrt{\pi}} \left(\frac{\Delta}{r}\right)^{3/2}. \quad (65)$$

Этот результат совпадает с выражением (32) для  $\tilde{\rho}^{(1)}(\mathbf{r})$ , вычисленным для потенциала (15) в случае  $R\Delta \ll 1$ . Поправки по параметру  $U$  могут быть легко вычислены. Для этого необходимо разложить функции Бесселя в выражении (54).

В случае  $U > \Delta$  выделяем главный по параметру  $R\Delta$  вклад и получаем

$$\mathcal{L}_V \approx \frac{UR\Delta}{\sqrt{U^2 - \Delta^2}} \frac{J_1(R\sqrt{U^2 - \Delta^2})}{J_0(R\sqrt{U^2 - \Delta^2})}. \quad (66)$$

Функция  $\mathcal{L}_V$  регулярна при  $U = \Delta$  и равна (64). При  $U \gg \Delta$  получаем

$$\mathcal{L}_V \approx R\Delta \frac{J_1(UR)}{J_0(UR)}. \quad (67)$$

Видно, что функция  $\mathcal{L}_V$  имеет особенность при  $U = g_c/R$ . Данное значение потенциала получено в главном порядке по параметру  $R\Delta$ . Как описано выше, особенность возникает при  $U = U_0$ , однако с нашей точностью  $U = U_c$ , см. (27). Поскольку два значения совпали, а при  $U > U_c$  связанное состояние с минимальной энергией исчезает из спектра, индуцированный заряд совпадает с функцией  $\tilde{\rho}$ . Таким образом, при  $R\Delta \ll 1$  получаем

$$\rho_{ind}(\mathbf{r}) = \tilde{\rho}(\mathbf{r}).$$

Подчеркнем, что данное выражение для плотности индуцированного заряда не справедливо при значениях потенциала, близких к  $U_c$ . Отметим также, что знак плотности индуцированного заряда изменяется скачком при  $U = U_c$ .

Исследуем поведение индуцированного заряда, находящегося на больших расстояниях при  $R\Delta \ll 1$ :

$$Q_{>}(r) = 2\pi \int_r^\infty dr' r' \rho_{ind}(r'). \quad (68)$$

Для вычисления  $Q_{>}(r)$  в главном приближении по  $R\Delta$  мы подставляем  $\tilde{\rho}(r')$ , см. (56), вместо  $\rho_{ind}(r')$  в (68), оставляем только слагаемое с  $m = 0$ . Затем вычисляем  $\beta_0$  и  $\alpha_0$  в главном приближении по пара-

метру  $R\Delta$ , выполняем интегрирование по  $r'$ , делаем замену переменных  $\epsilon \rightarrow \epsilon/\Delta$  и получаем

$$Q_{>}(r) = -eNR\Delta J_0(UR)J_1(UR) \times \int_0^\infty d\epsilon \frac{e^{-2r\Delta\sqrt{1+\epsilon^2}}}{J_0^2(UR) + 4\epsilon^2(R\Delta)^2 \ln^2(R\Delta)J_1^2(UR)}. \quad (69)$$

Если

$$|J_0(UR)| \gg \frac{R\sqrt{\Delta}|\ln(R\Delta)|}{\sqrt{r}},$$

то

$$Q_{>}(r) = -\frac{eN\sqrt{\pi\Delta}R J_1(UR)}{2\sqrt{r}J_0(UR)} e^{-2r\Delta}. \quad (70)$$

Если

$$|UR - g_c| \ll \frac{R\sqrt{\Delta}|\ln(R\Delta)|}{\sqrt{r}},$$

то

$$Q_{>}(r) = -\frac{eN\pi \operatorname{sign}(g_c - UR)}{4|\ln(R\Delta)|} e^{-2r\Delta}. \quad (71)$$

Таким образом, заряд, находящийся снаружи окружности радиуса  $r$ , изменяется скачком при превышении критической глубины потенциала.

Рассмотрим поведение индуцированного заряда  $Q_{<}(r)$ , который находится внутри окружности радиуса  $r$ . При  $UR < g_c$  полный индуцированный заряд  $Q_{tot} = Q_{<}(r) + Q_{>}(r) = 0$ . Поэтому  $Q_{<}(r) = -Q_{>}(r)$ . В случае, когда  $UR$  больше минимального  $g_c$ , полный индуцированный заряд  $Q_{tot} = eNM$ , где  $M$  — число критических значений  $g_c$ , меньших  $UR$ , т. е. число уровней, исчезнувших из дискретного спектра. Это связано с процессами, аналогичными процессам рождения электрон-позитронных пар [23]. Поэтому в случае  $R\Delta \ll 1$  и при условии, что параметр  $UR$  больше минимального значения  $g_c$ , получаем  $Q_{<}(r) = eNM + Q_{>}(r)$ . Поскольку индуцированный заряд  $Q_{>}(r)$  экспоненциально подавлен, имеем  $Q_{<}(r) \approx eNM$ .

Отметим, что рассматривать задачу при глубине потенциала, большей чем  $g_c/R$ , где  $g_c$  — наименьшее положительное решение уравнения  $J_0(g_c) = 0$ , не имеет смысла, поскольку при  $U > g_c/R$  задача становится многочастичной. При  $U$ , большем минимального критического значения, поле рождает четыре электрон-дырочные пары. Дырки уходят на бесконечность, а электроны, в зависимости от величины  $R$ , локализуются либо на масштабе потенциала  $R$ , либо на масштабе комптоновской длины волны электрона в материале,  $1/\Delta$ , см. [23, 25]. Поэтому при вычислении индуцированного заряда при  $U > U_c$  необходимо также учесть потенциал, создаваемый рожденными электронами.

## 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе мы исследовали поведение плотности индуцированного заряда в поле потенциальной ямы. Мы показали, что в широкой области значения параметров локализованного потенциала плотность индуцированного заряда представляется в виде произведения функции, зависящей от расстояния, и функции, зависящей от параметров потенциала, т. е. зависимости от расстояния и потенциала факторизуются. При приближении глубины потенциала к критическому значению существует область расстояний (60), на которых плотность индуцированного заряда представляется в факторизованном виде. В случае, когда глубина потенциала превышает критическое значение, плотность индуцированного заряда изменяется скачком на величину, пропорциональную квадрату волновой функции состояния, исчезающего из дискретного спектра (62). Для потенциала (15) в случае  $R\Delta \ll 1$  мы нашли аналитическое выражение для плотности индуцированного заряда (53) (см. также (33) и (66)). Мы исследовали поведение индуцированного заряда, находящегося вне окружности большого радиуса и внутри этой окружности.

## ЛИТЕРАТУРА

1. E. H. Wichmann and N. M. Kroll, *Phys. Rev.* **101**, 843 (1956).
2. L. S. Brown, R. N. Cahn, and L. D. McLerran, *Phys. Rev. D* **12**, 581 (1975).
3. А. И. Мильштейн, В. М. Страховенко, *ЖЭТФ* **84**, 1247 (1983) [*Sov. Phys. JETP* **57**, 722 (1983)].
4. Я. Б. Зельдович, В. С. Попов, *УФН* **105**, 403 (1971) [*Sov. Phys. Usp.* **14**, 673 (1972)].
5. D. P. DiVincenzo and E. J. Mele, *Phys. Rev. B* **29**, 1685 (1984).
6. K. Nomura and A. H. MacDonald, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 076602 (2007).
7. T. Ando, *J. Phys. Soc. Jpn* **75**, 074716 (2006).
8. E. H. Hwang, S. Adam, and S. Das Sarma, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 186806 (2007).
9. M. I. Katsnelson, *Phys. Rev. B* **74**, 201401(R) (2006).

10. A. V. Shytov, M. I. Katsnelson, and L. S. Levitov, Phys. Rev. Lett. **99**, 236801 (2007).
11. V. M. Pereira, J. Nilsson, and A. H. Castro Neto, Phys. Rev. Lett. **99**, 166802 (2007).
12. R. R. Biswas, S. Sachdev, and D. T. Son, Phys. Rev. B **76**, 205122 (2007)
13. M. M. Fogler, D. S. Novikov, and B. I. Shklovskii, Phys. Rev. B **76**, 233402 (2007)
14. I. S. Terekhov, A. I. Milstein, V. N. Kotov, and O. P. Sushkov, Phys. Rev. Lett. **100**, 076803 (2008).
15. V. N. Kotov, B. Uchoa, V. M. Pereira, F. Guinea, and A. H. Castro Neto, Rev. Mod. Phys. **84**, 1067 (2012).
16. V. M. Pereira, V. N. Kotov, and A. H. Castro Neto, Phys. Rev. B **78**, 035119 (2008)
17. A. I. Milstein and I. S. Terekhov, Phys. Rev. B **81**, 125419 (2010).
18. D. Xiao, G.-B. Liu, W. Feng, X. Xu, and W. Yao, Phys. Rev. Lett. **108**, 196802 (2012).
19. Yu. Voronina, K. Sveshnikov, P. Grashin, and A. Davydov, Physica E **106**, 298 (2019).
20. К. А. Свешников, Ю. С. Воронина, А. С. Давыдов, П. А. Грашин, ТМФ **199**, 69 (2019).
21. R. N. Lee and A. I. Milstein, Phys. Lett. A **189**, 72 (1994).
22. А. И. Ахиейзер, В. Б. Берестецкий, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1981).
23. Я. В. Зельдович, В. С. Попов, УФН **150** (3), 403 (1971).
24. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов сумм рядов и произведений*, Физматгиз, Москва (1963).
25. V. M. Pereira, V. N. Kotov, and A. H. Castro Neto, Phys. Rev. B **78**, 085101 (2008).

# ВЛИЯНИЕ ТОЛЩИНЫ ИНКАПСУЛИРУЮЩИХ СЛОЕВ НА КАЧЕСТВО ГЕТЕРОСТРУКТУР НА ОСНОВЕ $\text{MoSe}_2$

А. С. Бречкин, Г. М. Гольшиков, А. В. Черненко\*

*Институт физики твердого тела им. Ю. А. Осипьяна Российской академии наук  
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 17 ноября 2022 г.,  
после переработки 10 февраля 2023 г.  
Принята к публикации 13 февраля 2023 г.

Исследована зависимость ширины линий фотолюминесценции экситонов и трионов в монослоях  $\text{MoSe}_2$  от толщины инкапсулирующих слоев гексагонального нитрида бора. Проверена возможность вариации ширины линии фотолюминесценции экситонов за счет их взаимодействия с модами резонаторов, образованных кремниевой подложкой и верхним слоем нитрида бора. Это взаимодействие может приводить к существенным изменениям ширины линий фотолюминесценции за счет эффекта Парселла. Измерения, выполненные на серии образцов с разной толщиной верхнего и нижнего слоев нитрида бора, не выявили влияния эффекта Парселла на ширину линии. Тем не менее оказалось, что ширина линий уменьшается в несколько раз при увеличении толщины нижнего слоя нитрида бора с 10 до 100 нм и при толщине 100 нм достигает порядка 2 мэВ. Такое сужение линий фотолюминесценции предположительно связано с уменьшением плотности пузырей субмикронного размера из-за релаксации продольного напряжения в толстом слое нитрида бора.

DOI: 10.31857/S0044451023060111  
EDN: DHDYOE

## 1. ВВЕДЕНИЕ

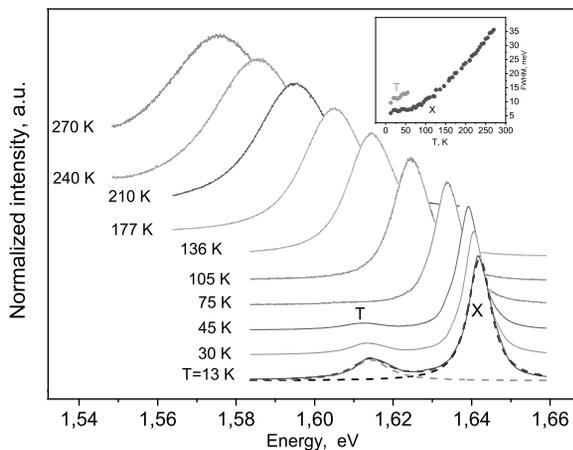
Монослои дихалькогенидов переходных металлов (ДПМ) привлекают внимание исследователей уникальными свойствами, которые делают их перспективным материалом для оптоэлектронных приложений и интересным объектом для исследований. В первую очередь это определяется большой энергией связи экситонов, на полтора-два порядка превышающей энергию связи экситонов в квантовых ямах, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии [1]. Благодаря этому, экситоны в монослоях ДПМ наблюдаются при температурах вплоть до комнатной. Сильное взаимодействие света с двумерными экситонами делает монослои ДПМ перспективным материалом для оптоэлектронных приложений [2].

Ван-дер-ваальсова связь между монослоями позволяет создавать сложные многослойные гетероструктуры с монослоями ДПМ механической эксфо-

лиацией, являющейся доступной и недорогой технологией. Двухслойные структуры, созданные таким способом, дают возможность наблюдать внутрислойные (прямые) и межслойные (непрямые) экситоны и трионы, существующие при комнатных температурах, и изучать их свойства. Гетероструктуры на основе  $\text{MoSe}_2$  перспективны для этих целей.

Качественные ван-дер-ваальсовы гетероструктуры характеризуются минимальным неоднородным уширением линий фотолюминесценции (ФЛ). Однородная ширина линии ФЛ экситонов в монослоях  $\text{MoSe}_2$ , определяемая временем экситонной когерентности, лежит в диапазоне 2–4 мэВ [3, 4]. Ширина линии ФЛ экситона сильно зависит от температуры из-за экситон-фононного взаимодействия и минимальна при  $T \rightarrow 0$  К. При гелиевых температурах в ширину линии ФЛ, превышающую однородную, помимо экситон-фононного взаимодействия, дают вклад неоднородная деформация, рассеяние на дефектах двумерной решетки, экситон-экситонное взаимодействие, рассеяние экситонов на свободных носителях. Существенное неоднородное уширение оказывается главным препятствием для спектроскопического изучения различных эффектов в ДПМ.

\* E-mail: chernen@issp.ac.ru



**Рис. 1.** Спектры ФЛ инкапсулированного слоя  $\text{MoSe}_2$  при разных температурах и фиксированной плотности накачки. Линии X и T соответствуют ФЛ экситона и отрицательно заряженного триона. Форма линии лучше всего аппроксимируется функцией Фойхта. Такая аппроксимация для линии экситона (красная линия), триона (зеленая линия) и суммарная (черная линия), приведена для спектра, записанного при  $T = 13$  K. Зависимость ширины линий ФЛ на полувысоте (FWHM) от температуры приведена на вставке

Важнейшим шагом на пути к уменьшению ширины линии ФЛ экситонов в ДМП является инкапсулирование монослоев, то есть помещение их между слоями гексагонального нитрида бора (hBN), что изолирует монослои от контакта с атмосферой [2, 5–7]. Толщина инкапсулирующих слоев hBN лежит в широком диапазоне значений от единиц до сотен нанометров.

Типичная ширина линий ФЛ экситонов и трионов в инкапсулированных монослоях  $\text{MoSe}_2$  с толщиной верхнего и нижнего слоев hBN  $\sim 5$ –30 нм при гелиевых температурах и умеренном уровне оптической накачки составляет 6–7 мэВ. Она существенно зависит от температуры, как это видно на рис. 1.

Несмотря на усилия по улучшению качества интерфейсов инкапсулированных слоев  $\text{MoSe}_2$  посредством аккуратного взаимного выравнивания слоев, минимизации контакта монослоев с атмосферой, высокотемпературного отжига в атмосфере, получить линии ФЛ шириной менее 6 мэВ при гелиевых температурах в таких структурах не удалось.

Инкапсулированные монослои ДМП, подобные исследованным в данной работе, собираются на подложке  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  [5–8]. Недавно в работе [8] было высказано предположение, что верхний инкапсулирующий слой hBN и поверхность кремния подложки могут служить зеркалами микрорезонатора, меж-

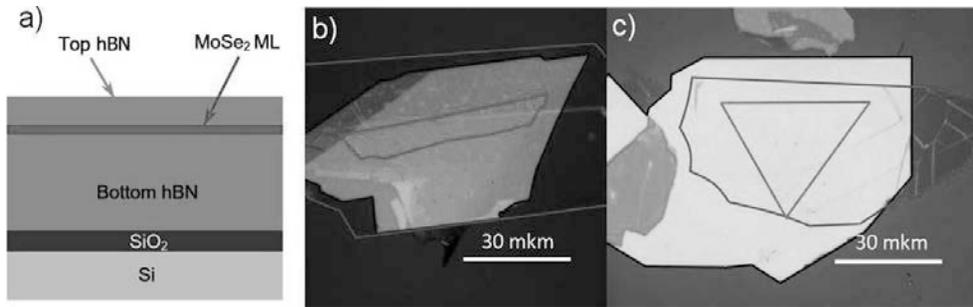
ду которыми находится слой ДМП. Согласно этой работе, эффект Парселла, т. е. изменение времени излучательной рекомбинации из-за взаимодействия с оптическими модами резонатора, должен приводить к осцилляциям времени жизни 2D-экситонов в монослое и, как следствие, к осцилляциям ширины линии ФЛ экситона при монотонном увеличении толщины слоя hBN. Это верно при условии, что влияние неоднородного уширения незначительно. Согласно [8] ширина линии ФЛ осциллирует с изменением толщины нижнего слоя hBN с периодом порядка 150 нм.

Для того чтобы проверить эти выводы и добиться возможного уменьшения ширины линий, были проведены измерения ФЛ образцов, содержащих инкапсулированные монослои  $\text{MoSe}_2$ , помещенные между слоями hBN различной толщины.

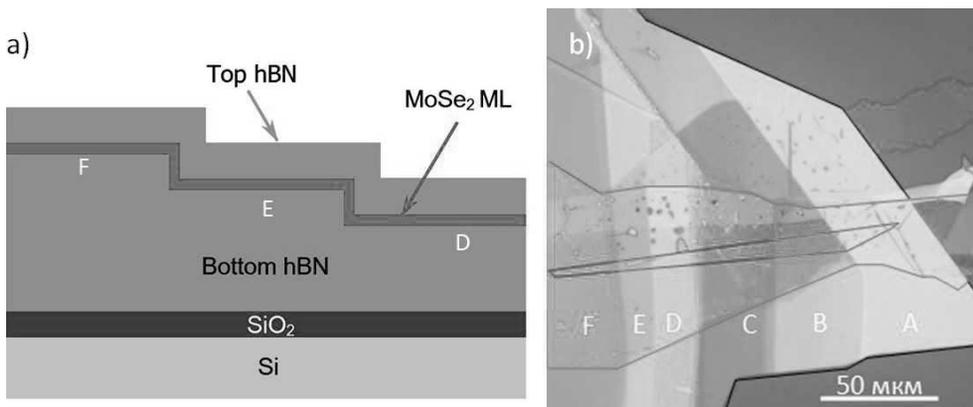
## 2. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Для поиска возможного влияния эффекта Парселла на спектры ФЛ инкапсулированных слоев были созданы серии образцов двух типов. Образцы первого типа, показанные на рис. 2, представляли собой инкапсулированные монослои, которые помещались на подложку  $\text{SiO}_2(285 \text{ нм})/\text{Si}$ . Образцы в серии отличались друг от друга толщиной нижнего слоя hBN, находящейся в диапазоне 10–250 нм с шагом 20–30 нм. Толщина слоев hBN определялась с помощью профилометра и атомного силового микроскопа. Образцы второго типа являлись инкапсулированными монослоями  $\text{MoSe}_2$  со «ступенчатым» нижним слоем толщиной от 10 до 300 нм (см. рис. 3), аналогичными использованным в работе [8]. Толщина верхнего слоя hBN для обеих серий была примерно одинакова и составляла около 10 нм. Преимуществом структур второго типа являлось то, что все слои собирались в одинаковых условиях для минимизации неконтролируемых воздействий на процесс сборки. Серия образцов первого типа содержала 12 структур разной толщины, кроме того, было исследовано 6 образцов второго типа с индивидуальным набором «ступенек» нижнего слоя hBN, по 4–6 шт. у каждого образца. Кроме этих двух серий была исследована серия из четырех образцов с одинаковой толщиной нижнего слоя hBN порядка 100 нм и различной толщиной верхнего слоя от 10 до 100 нм с шагом около 30 нм.

Образцы изготавливались методом механической эксфолиации слоев hBN и монослоев  $\text{MoSe}_2$  на промежуточную подложку полидиметилсилоксана с



**Рис. 2.** Схема гетероструктуры hBN–MoSe<sub>2</sub>–hBN (a). Фотография такой гетероструктуры с тонким нижним слоем hBN 10 нм (b) и с толстым нижним слоем hBN ~ 100 нм (c). Красной линией обведены контуры монослоя MoSe<sub>2</sub>, синей — верхнего слоя hBN, черной — нижнего. На рис b видны характерные пузыри, возникающие на интерфейсах структуры, на рис c они не видны

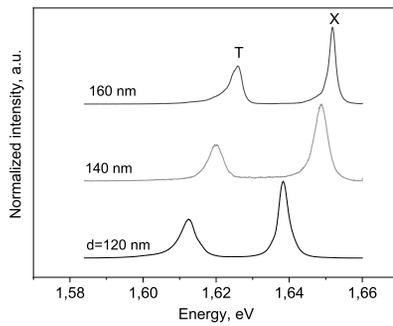


**Рис. 3.** Схема гетероструктуры hBN–MoSe<sub>2</sub>–hBN с градиентом толщины нижнего слоя (a). Фотография образца с разной толщиной нижнего слоя hBN (b): А — 100 нм, В — 130 нм, С — 160 нм, D — 200 нм, E — 230 нм, F — 260 нм. Красной линией обведены контуры монослоя, синей — верхнего слоя hBN, черной — нижнего

помощью специального скотча [6]. Этот метод позволял получить набор слоев hBN в широком диапазоне размеров в плоскости структуры от 10 до 200 мкм и толщиной от 10 нм до 300 нм, в том числе со ступенчатым градиентом толщины. Каждой толщине слоя hBN в диапазоне от 10 до 300 нм, как на промежуточной подложке полидиметилсилоксана, так и на подложке SiO<sub>2</sub>(285 нм)/Si, соответствует свой характерный цвет, как это видно на рис. 3 b, что позволяло быстро подобрать нужную толщину слоя hBN. Для изготовления слоев использовался коммерческий материал фирмы HQgraphene, для сборки гетероструктур — система переноса той же фирмы. Из всего набора слоев hBN подбирались слои требуемой толщины, схожей формы и размеров с выбранным для данной гетероструктуры монослоем MoSe<sub>2</sub> и последовательно собирались на подложке SiO<sub>2</sub>/Si. Каждый слой переносился и накладывался контролируемо в необходимом направлении с высокой точностью по положению (~ 1–2 мкм) и уг-

лу поворота (~ 1 град.), особой аккуратности требовал перенос монослоя MoSe<sub>2</sub> на слой hBN со ступенчатым градиентом толщины, поскольку в этом случае повышалась вероятность того, что монослой MoSe<sub>2</sub> разорвется при наложении на ступенчатую поверхность. После сборки гетероструктуры отжигались на воздухе при температуре 150° – 180° С.

Измерения ФЛ проводились при нерезонансном возбуждении одномодовым лазером с длиной волны 532 нм, который фокусировался в пятно размером 2–8 мкм в диаметре с помощью объективов с различными фокусными расстояниями. Измерения ФЛ проводились при температуре 2 К в заливочном криостате для оптических исследований или в проточном криостате для температурных измерений в диапазоне 10–295 К. Для записи спектров использовался однорешеточный монохроматор, сигнал детектировался охлаждаемой ПЗС-камерой.



**Рис. 4.** Спектры ФЛ одного из образцов с монослоем  $\text{MoSe}_2$  и градиентом нижнего слоя  $\text{hBN}$  при  $T = 2 \text{ K}$ ,  $X$  и  $T$  — линии экситонов и трионов соответственно. Положение линий экситонов и трионов скачком сдвигаются при переходе от одного слоя к другому из-за изменения их энергии связи

### 3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Как видно на рис. 4, при переходе от слоя к слою происходит скачок положения линии ФЛ в спектре, вызванный изменением диэлектрического экранирования электронно-дырочного взаимодействия [1].

Характерные спектры ФЛ инкапсулированных структур при разных уровнях оптического возбуждения приведены на рис. 5 *a*. Зависимости интегральной интенсивности и ширины линий трионов и экситонов от плотности оптического возбуждения представлены на рис. 5 *a* и *b* соответственно. Серия спектров, записанная при разных температурах, свидетельствует о том, что при повышении температуры примерно до 100 К линия ФЛ трионов  $T$  исчезает. В спектре остается только линия  $X$  экситонов, как это видно на рис. 1. Отношение интенсивностей линий  $X$  и  $T$  при фиксированной температуре и плотности накачки меняется от образца к образцу и может быть неодинаковым в разных точках одной структуры вследствие неоднородности. Исчезновение линии триона из спектра происходит при температурах существенно меньших, чем энергия связи триона  $\sim 30 \text{ мэВ}$ . Скорее всего, это связано с быстрым уменьшением плотности электронов в монослое с температурой, а не термической диссоциацией трионов.

Измерения не выявили закономерностей в поведении ширины линий, подобных наблюдаемым в [8]. Спектры ФЛ демонстрируют заметный, до 8 мэВ, разброс положения линий для образцов с близкими параметрами, т. е. помещенных на одинаковую под-

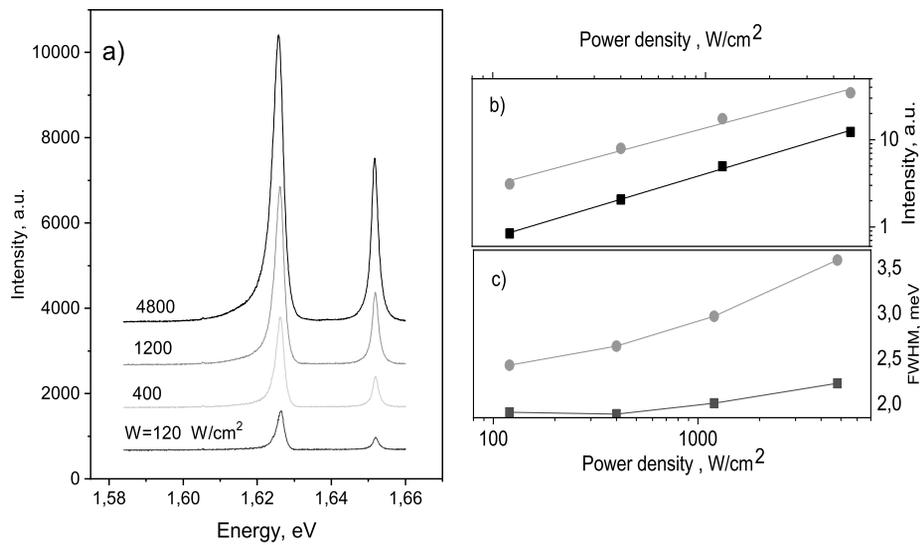
ложку и имеющих одинаковые толщины инкапсулирующих слоев.

Выяснилось, что при уменьшении диаметра пятна лазерного возбуждения с 8 до 2 мкм, в линиях ФЛ начинают проявляться плечи и разрешаться линии, которые не были разрешимы ранее. Естественно предположить, что причиной такого поведения линий является наличие латеральных неоднородностей на интерфейсах образцов. На фотографии образца на рис. 2 *b* хорошо различимы пузыри диаметром в единицы и десятки микрон. Кроме пузырей микронного размера, возможно существование пузырей субмикронного и даже нанометрового размера [9]. Например, на фотографии образца на рис. 2 *c* пузыри не заметны, тем не менее, наблюдаемый разброс положения линий ФЛ при сканировании поверхности и флуктуации ширины линий ФЛ, сравнимы с таковыми для образца на рис. 2 *b*.

Кроме измерений образцов ФЛ двух описанных выше серий, были проведены измерения нескольких образцов с различной толщиной верхнего инкапсулирующего слоя, поскольку он также является элементом микрорезонатора. Спектры ФЛ таких структур характеризуются заметным энергетическим смещением линии ФЛ экситонов с ростом толщины верхнего слоя  $\text{hBN}$ , что связано с изменением экранировки электронно-дырочного взаимодействия [1]. Однако ширины линий ФЛ в этом случае оказались достаточно большими и не демонстрировали регулярной зависимости от толщины слоя  $\text{hBN}$ .

Несмотря на это, выяснилось, что можно добиться уменьшения ширины линий вплоть до примерно 2 мэВ увеличением толщины слоя  $\text{hBN}$  более 100 нм. Главным фактором, влияющим на флуктуации ширины и положения линий ФЛ, являются пузыри на интерфейсах, размеры которых варьируются в широких пределах от нанометров до десятков микрон. Скорее всего, улучшение качества структур с ростом толщины слоя нитрида бора связано с уменьшением плотности пузырей субмикронного размера, не видимых визуально. Это означает, что сужение линий ФЛ вызвано релаксацией продольного напряжения в толстом слое  $\text{hBN}$ , приводящего к меньшей плотности пузырей субмикронного размера, и не связано с эффектом Парселла.

Типичная зависимость ширины линии ФЛ от температуры для одного из образцов, представленная на рис. 1, показывает сверхлинейный рост ширины линии ФЛ экситонов и трионов с температурой. Такой рост наблюдался и в других работах и объяснялся экситон-фононным взаимодействием [10]. Со-



**Рис. 5.** Спектры ФЛ инкапсулированного слоя  $\text{MoSe}_2$ , записанные при температуре 2 К и разной плотности оптического возбуждения  $W$  (a),  $X$  и  $T$  — линии экситона и триона соответственно. Зависимость интегральной интенсивности (b) и ширины (c) линий экситона и триона от  $W$ . Красные кружки соответствуют значениям для трионов, черные квадраты — для экситонов. Прямые линии — результаты линейной аппроксимации

гласно теоретической модели из работы [11], главный вклад в сверхлинейный рост ширины линии с температурой дает междолинное рассеяние экситонов на оптических фононах, под которым понимается рассеяние электронов или дырок, составляющих экситон, из долины в другие точки зоны Бриллюэна. В этой работе наряду с междолинным рассеянием также рассматривались механизмы уширения, связанные с внутримолекулярным рассеянием экситонов на акустических и оптических фононах и радиационная рекомбинация экситонов. В [11] утверждается, что в  $\text{MoSe}_2$  рост ширины линии с температурой ФЛ должен быть фактически линейным, поскольку междолинное рассеяние в этом ДПМ достаточно слабое. Однако результаты, представленные на рис. 1, указывает на значимость процессов междолинного рассеяния.

Кроме перечисленных механизмов в уширение линий ФЛ с температурой может давать вклад экситон-экситонное взаимодействие, роль которого возрастает с ростом плотности экситонов. Действительно, линии ФЛ экситонов и трионов уширяются с ростом плотности оптического возбуждения, как это видно на рис. 5 c.

На рис. 5 b приведена зависимость интегральной интенсивности ФЛ от плотности мощности накачки  $W$  для спектров на рис. 5 a. Она хорошо приближается степенной зависимостью  $I \propto W^\alpha$ , где пока-

затель степени  $\alpha_X = 0.73 \pm 0.03$  для экситонов и  $\alpha_T = 0.65 \pm 0.04$  для трионов. Степенная зависимость интенсивности ФЛ от накачки типична для краевой ФЛ полупроводников [12]. Такая зависимость наблюдалась ранее в ДПМ [13,14]. Показатели степени для экситонов  $\alpha_{X,T}$  в [13] находились в диапазоне 0.7–1 и близки к найденным выше значениям. Интенсивность линии экситона  $X$  растет с накачкой быстрее интенсивности линии триона  $T$  из-за конечной плотности свободных носителей, необходимых для образования трионов, что типично для квантовых ям и монослоев.

Из-за неоднородного поля деформации пузыри субмикронного размера являются минимумами энергии для экситонов [15,16], что приводит к их локализации при низких температурах. Локализацией экситонов на пузырьках объясняется заметная вариация спектрального положения их линий ФЛ (до 8 мэВ), наблюдаемых в исследуемых структурах, а также уширение линий.

Несмотря на влияние пузырей на спектры ФЛ, возможную локализацию экситонов и уширение линий ФЛ, существование свободных экситонов в образцах ДПМ подтверждается измерениями закона дисперсии последних в монослоях [17], а также исследованиями экситонных поляритонов в слоях ДПМ, помещенных в резонаторы [18,19]. Вопрос о существовании свободных трионов в таких

структурах остается открытым. Экспериментальные результаты свидетельствуют о том, что линия ФЛ триона в среднем шире линии ФЛ экситонов, что может быть следствием их сильной локализации.

Таким образом, были исследованы спектры ФЛ инкапсулированных hBN слоев MoSe<sub>2</sub> двух типов: с различными толщинами нижнего слоя hBN и со «ступеньками» разной толщины на одной подложке. Эти измерения не выявили осциллирующей зависимости ширины линий ФЛ от толщины слоев hBN, как это предполагалось при учете эффекта Парселла. Было установлено, что ширину линий ФЛ экситонов и трионов можно уменьшить с 6–7 мэВ вплоть до 2 мэВ при увеличении толщины нижнего слоя hBN до 100 нм и более. Главным фактором, влияющим на флуктуации ширины и положения линий ФЛ, является неоднородная деформация, вызванная пузырями на интерфейсах, размеры которых варьируются в широких пределах от нанометров до десятков микрон. Улучшение качества структур с ростом толщины слоя нитрида бора связано, по нашему мнению, с уменьшением плотности пузырей субмикронного размера, не наблюдаемых визуаль-но.

**Финансирование.** Работа была выполнена в рамках госзадания ИФТТ РАН.

## ЛИТЕРАТУРА

1. G. Wang, A. Chernikov, M. Glazov et al., *Rev. Mod. Phys.* **90**, 021001 (2018).
2. Arash Rahimi-Iman, *Semiconductor Photonics of Nanomaterials and Quantum Structures Applications in Optoelectronics and Quantum Technologies*, Springer Series in Solid-State Sciences, Springer Science and Business Media Deutschland GmbH (2021).
3. G. Moody, D. C. Kavir, K. Hao et al., *Nat. Commun.* **6**, 8315 (2015).
4. T. Jakubczyk, V. Delmonte, M. Koperski et al., *Nano Lett.* **16**, 5333 (2016).
5. F. Cadiz, E. Courtade, C. Robert et al., *Phys. Rev. X* **7**, 021026 (2017).
6. А. В. Черненко, А. С. Бричкин, *Изв. РАН, сер. физ.* **85**, 245 (2021).
7. J. Wierzbowski, J. Klein, F. Sigger et al., *Sci. Rep.* **7**, 12383 (2017).
8. H. H. Fang, B. Han, C. Robert et al., *Phys. Rev. Lett.* **123**, 067401 (2019).
9. G. D. Shepard, A. A. Obafunso, Li Xiangzhi et al., *2D Mater.* **4**, 021019 (2017).
10. M. Selig, G. Berghaeuser, A. Raja et al., *Nat. Commun.* **7**, 13279 (2016).
11. J. C. G. Henriques, N. A. Mortensen, and N. M. R. Peres, *Phys. Rev. B* **103**, 235402 (2021).
12. T. Schmidt, K. Lischka, and W. Zulehne, *Phys. Rev. B* **45**, 8989 (1992).
13. S. Lippert, L. M. Schneider, D. Renaud et al., *2D Mater.* **4**, 025045 (2017).
14. D. Kaplan, Y. Gong, K. Mills et al., *2D Mater.* **3**, 015005 (2016).
15. E. Khestanova, F. Guinea, L. Fumagalli et al., *Nat. Commun.* **7**, 12587 (2016).
16. A. V. Tyurnina, D. A. Bandurin, E. Khestanova et al., *ACS Photonics* **6**, 516 (2019).
17. L. Schneider, S. Esdaille, D. Rhodes et al., *Opt. Express* **23**, 37131 (2019).
18. S. Dufferwiel, S. Schwarz, F. Withers, et al., *Nat. Commun.* **6**, 8579 (2015).
19. T. LaMountain, J. Nelson, E. J. Lenferink et al., *Nat. Commun.* **12**, 4530 (2021).

# ДИПОЛЬНАЯ ПЛАЗМОННАЯ МОДА В НАНОРАЗМЕРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ ТИПА «ЯДРО-ОБОЛОЧКА» С ГЕТЕРОПЕРЕХОДОМ ВТОРОГО РОДА

*А. Н. Ипатов*<sup>a,b\*</sup>

<sup>a</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого  
195251, Санкт-Петербург, Россия

<sup>b</sup> Академический университет им. Ж. И. Алфёрова  
194021, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 19 ноября 2022 г.,  
после переработки 26 февраля 2023 г.  
Принята к публикации 27 февраля 2023 г.

Исследованы возбужденные состояния наноразмерных двухкомпонентных полупроводниковых кристаллов типа «ядро–оболочка» с гетеропереходом второго рода. Продемонстрировано, что в их спектрах фотопоглощения доминирует дипольный плазмонный резонанс. При этом оказалось, что варьирование высоты потенциального барьера между ядром и оболочкой в сравнительно узком диапазоне приводит к принципиальному изменению характера коллективной моды от поверхностного плазмонного резонанса, типичного для спектров фотопоглощения проводящих наноразмерных частиц, к вращательной плазмонной моде, при которой возбуждаются только угловые степени свободы.

DOI: 10.31857/S0044451023060123

EDN: DHGEJR

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Развитие технологий в области нанoeлектроники и нанофотоники в течение последних десятилетий привело к острой необходимости создания принципиально новых материалов, физические и химические свойства которых отличаются от свойств соответствующих объемных компонентов. Одно из направлений, квантовая плазмоника, в настоящее время является быстро развивающейся областью исследований, которая включает в себя изучение квантовых свойств света и механизмов его взаимодействия с материей на наноразмерном уровне [1–3].

Оптические свойства наноразмерных проводящих частиц определяются наличием локализованных поверхностных плазмонных резонансов (LSPR) в их спектрах возбужденных состояний [2, 4–8]. Полупроводниковые нанокристаллы и квантовые точки представляют собой перспективный тип материалов с плазмонным резонансом в оптическом спек-

тре [4, 5, 9–15], причем частоты их плазмонных мод как правило лежат намного ниже по сравнению с резонансными частотами в металлических наночастицах [16] и могут варьироваться в широком диапазоне от терагерцовой до инфракрасной и видимой частей спектра [16–22] путем изменения параметров как материала самого нанокристалла, так и окружающей его среды [13, 14, 16, 17, 21, 24–27], а также от использованного метода легирования, от которого зависит конфигурация носителей заряда основного состояния системы [13, 18, 19, 28–30].

В зависимости от распределения плотности локализованных зарядов дипольный плазмон может представлять собой как гармонические колебания в направлении нормали к поверхности ионного остова [31, 32], так и вращательное движение системы зарядов, при котором они осциллируют тангенциально по отношению к границе кора внутри сравнительно тонкого сферического слоя, в то время, как радиальное движение практически не включается [33, 34].

Коллоидные нанокристаллы (квантовые точки) типа «ядро–оболочка» состоят из двух (или более) полупроводниковых материалов, образующих структуру из подсистем, разделенных барьером ге-

\* E-mail: andrei\_ipatov@mail.ru

тероперехода. Они отличаются от «однокомпонентных» квантовых точек существенно более высокой фотохимической стабильностью [35], причем особенности их строения позволяют легко варьировать их зонную структуру для создания элементарной базы наноразмерной оптоэлектроники [36–39].

Возможность варьирования таких оптических свойств наноразмерных квантовых точек «ядро–оболочка» (далее CSQD, core-shell quantum dots), как длина волны люминесценции, квантовый выход и время жизни возбужденных состояний системы, привела к значительному прогрессу в технологиях синтеза подобных структур [39–41]. С практической точки зрения внешняя оболочка также играет роль барьера между ядром и окружающей средой, что делает нанокристалл менее чувствительным к изменениям физических и химических свойств окружения [39]. Этот эффект, в частности, дает возможность эффективного применения QSQD для создания биологических маркеров [35, 42].

В настоящее время в качестве основы для ядра и оболочки CSQD как правило используются полупроводники типа II-VI, IV-VI, III-V, образуя конфигурации вида CdSe/CdS, CdS/ZnS, CdSe/ZnS, InAs/CdSe, InP/ZnS [39, 40, 43].

В большинстве случаев изоляция ядра CSQD осуществляется путем нанесения поверх него полупроводникового материала с другой шириной запрещенной зоны, чем у материала ядра, таким образом, чтобы обе границы запрещенной зоны материала оболочки оказывались внутри запрещенной зоны ядра. При таком расположении энергетических зон оба типа носителей заряда, и электроны и дырки, оказываются заключенными внутри области ядра. Такая ситуация называется структурой первого типа или квантовой точкой с гетеропереходом первого рода. Напротив, в структурах второго типа, оптическим свойствам которых посвящена данная работа, взаимное расположение зон материалов ядра и оболочки таково, что обе границы и валентной зоны и зоны проводимости материала ядра оказываются ниже (или выше), чем у материала оболочки [44, 45]. В результате электроны и дырки оказываются пространственно разделенными барьером гетероперехода, так, что каждый из типов носителей заряда локализован в своей области [44]. Это приводит к существенному снижению скорости взаимной рекомбинации электронов и дырок и, таким образом, увеличивается их время жизни по сравнению со структурами первого рода [45–48].

Как было показано в работе [40], этот эффект может быть использован при создании полупровод-

никовых лазеров на основе наноразмерных квантовых точек. Также ожидается, что пространственное разделение носителей заряда в квантовых точках с гетеропереходом второго рода дает этим структурам преимущество при их использовании в качестве элементной базы для фотовольтаики [44] и фотолюминесценции [40, 41, 46, 47].

Важно также отметить, что в отличие от плазмонных мод как в однокомпонентных полупроводниковых наночастицах [17, 28, 29], так и в металлических кластерах [49–53], плазмонные колебания в нанокристаллах (квантовых точках) типа «ядро–оболочка» возбуждаются в системе, содержащей два типа делокализованных носителей заряда, взаимодействующих между собой. Коллективные явления в двухкомпонентных системах уже были предметом исследования в ряде работ [54–59], в которых было показано, что в оптических спектрах наноразмерных систем, содержащих свободные заряды противоположного знака, также наблюдается гигантский дипольный плазмонный резонанс. Однако характерной особенностью CSQD является то, что такая конфигурация может приводить к пространственному разделению зарядов разного знака благодаря наличию барьера гетероперехода второго рода между ядром и оболочкой.

В данной работе мы представляем теоретический анализ оптических свойств двухкомпонентных наноразмерных полупроводниковых систем типа «ядро–оболочка» второго типа. При описании их основного состояния была использована модель ступенчатого потенциала [60, 61], который при его достаточной высоте обеспечивает практически полное пространственное разделение компонент системы таким образом, что перекрытие одночастичных волновых функций электронов и дырок оказывается пренебрежимо мало.

Основной целью работы является исследование зависимости характера плазмонной моды от высоты потенциального барьера. Было продемонстрировано, что ее увеличение в сравнительно узком диапазоне значений приводит к существенному изменению распределения плотности делокализованных носителей заряда и, как результат, к переходу от поверхностного плазмонного резонанса Ми [62, 63] трансляционного типа, характерного, например, для металлических нанокластеров [9, 10], к вращательной поверхностной моде [33, 34].

Наш подход основан на самосогласованном квантово-механическом описании многочастичных возбуждений в системе делокализованных носителей заряда. Расчеты основного состояния

системы проводились в приближении Хартри–Фока с учетом нелокального обменного взаимодействия в подсистемах электронов и дырок.

Мы показываем, что по мере увеличения высоты барьера распределение электронной и дырочной плотностей в в квантовой точке имеет тенденцию к формированию узкого двойного электронно-дырочного слоя вблизи границы раздела ядра и оболочки. При этом заметная перестройка распределения плотности зарядов происходит при изменении высоты барьера в сравнительно узком диапазоне значений, что, в свою очередь, приводит к существенному изменению оптических характеристик системы, в частности, частоты плазмонного резонанса. Последний эффект связан в первую очередь с изменением характера плазмонной моды от поверхностной дипольной моды трансляционного типа, при которой эффективно возбуждается движение зарядов в радиальном направлении, к вращательной моде, для которой характерно возбуждение только угловых степеней свободы, в то время, как радиальное движение остается практически замороженным.

## 2. ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ ПОДХОД

Рассмотрим электронейтральную систему взаимодействующих фермионов, содержащую равное количество частиц отрицательного и положительного заряда, пространственно разделенных барьером гетероперехода второго рода и при этом связанных между собой кулоновским взаимодействием.

Пусть для примера в области ядра присутствуют  $N$  отрицательных свободных носителей заряда, а в области оболочки — такое же количество положительных. Подобный подход вполне оправдан при высоте барьера достаточной для того, чтобы разделить носители заряда противоположного знака. При меньших значениях высоты барьера, когда распределения плотности зарядов заметно перекрываются, эта простая модель, разумеется, не в полной мере соответствует ситуации, но, по нашему мнению, позволяет на качественном уровне адекватно описывать спектр возбужденных состояний двухкомпонентной системы.

Далее будем называть отрицательные частицы электронами с эффективной массой в зоне проводимости  $m_e$ , а положительные частицы, соответственно, дырками с эффективной массой в валентной зоне  $m_h$ .

Полный гамильтониан описываемой системы представляет собой гамильтониан  $N_e = N$  электронов и  $N_h = N_e$  дырок, взаимодействующих друг с другом посредством кулоновского потенциала  $V$ , с потенциалами внутри ядра и оболочки  $V_{\text{core}}$  и  $V_{\text{shell}}$ , соответственно,

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{e}^{N_e} \frac{\hat{\mathbf{p}}_a^2}{2m_e} + \sum_{h}^{N_h} \frac{\hat{\mathbf{p}}_a^2}{2m_h} + \sum_e V_{\text{core}}(r_e) + \sum_h V_{\text{shell}}(r_h) + \\ & + \frac{1}{2} \left( \sum_e^{N_e} V(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}'_e) + \sum_h^{N_h} V(\mathbf{r}_h, \mathbf{r}'_h) - \sum_{e,h}^{N_e, N_h} V(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) \right). \end{aligned} \quad (1)$$

В общем случае парное кулоновское взаимодействие между частицами в точках  $\mathbf{r}_a$  и  $\mathbf{r}_b$  эффективно экранировано путем введения статической диэлектрической проницаемости в соответствующем полупроводнике. Использование статической диэлектрической проницаемости в нашей модели обусловлено тем, что масштаб энергий электрон-дырочных комплексов соответствует энергии связи экситона Ванье–Мотта, для которой частотной зависимостью диэлектрической проницаемости можно пренебречь [64], так что мультипольное разложение потенциала межчастичного взаимодействия может быть записано в виде [65, 66]

$$V(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) = 4\pi e^2 \sum_{LM} \Phi_L(r_a, r_b) \frac{Y_{LM}(\mathbf{n}_a) Y_{LM}^*(\mathbf{n}_b)}{2L+1}, \quad (2)$$

где

$$\begin{aligned} \Phi_L((r_a, r_b) < r_{\text{core}}) &= \frac{r_{<}^L}{\varepsilon_1 r_{>}^{L+1}} + \frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(L+1)(r_a r_b)^L}{\varepsilon_1(L\varepsilon_1 + (L+1)\varepsilon_2)r_{\text{core}}^{2L+1}}, \\ \Phi_L((r_a, r_b) > r_{\text{core}}) &= \frac{r_{<}^L}{\varepsilon_2 r_{>}^{L+1}} + \frac{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)Lr_{\text{core}}^{2L+1}}{\varepsilon_2(L\varepsilon_1 + (L+1)\varepsilon_2)(r_a r_b)^{L+1}}, \\ \Phi_L(r_a < r_{\text{core}} < r_b) &= \frac{(2L+1)r_{<}^L}{(L\varepsilon_1 + (L+1)\varepsilon_2)r_{>}^{L+1}}, \end{aligned} \quad (3)$$

где  $r_{\text{core}}$  — радиус сферически симметричного ядра CSQD,  $r_{>,<}$  обозначают, соответственно, наибольший и наименьший из радиусов  $r_{a,b}$ , а  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$  — статические диэлектрические проницаемости ядра и оболочки. Однако, поскольку основной целью данной работы было исследование зависимости оптических свойств CSQD от высоты эффективного потенциального барьера, разделяющего области ядра

и оболочки, при проведении расчетов были приняты значения  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 1$ , чтобы не увеличивать число независимых параметров в используемой модели, где диэлектрические константы в первую очередь играют роль масштабирующего коэффициента по шкале энергий.

Поскольку в рамках модели ступенчатого потенциала электроны и дырки жестко ограничены в своем движении внутри объема наночастицы, запишем  $V_{\text{core}}$  и  $V_{\text{shell}}$ , соответственно, как [60, 61]

$$V_{\text{core}}(r) = \begin{cases} 0, & 0 < r < r_{\text{core}}, \\ V_c, & r_{\text{core}} < r < r_{\text{shell}}, \\ \infty, & r > r_{\text{shell}} \end{cases} \quad (4)$$

и

$$V_{\text{shell}}(r) = \begin{cases} V_v, & 0 < r < r_{\text{core}}, \\ 0, & r_{\text{core}} < r < r_{\text{shell}}, \\ \infty, & r > r_{\text{shell}}, \end{cases} \quad (5)$$

где  $r_{\text{shell}} > r_{\text{core}}$  — радиус оболочки CSQD, а потенциалы  $V_c$  и  $V_v$  определим, соответственно, как разности границ зон проводимости и валентных зон полупроводников, разделенных барьером гетероперехода. При проведении численных расчетов в данной работе был рассмотрен частный случай  $V_c = V_v = U_0$ .

Для описания межчастичного взаимодействия в основном состоянии системы было использовано приближение Хартри–Фока, в рамках которого одночастичные волновые функции электронов  $\phi_i(\mathbf{r}_i^{(e)})$  и дырок  $\psi_a(\mathbf{r}_a^{(h)})$  удовлетворяют самосогласованным уравнениям [57, 58, 67]:

$$-\frac{\hbar^2 \Delta_i}{2m_e} \phi_i(\mathbf{r}_i^{(e)}) + \left( U_{\text{core}}(\mathbf{r}_i^{(e)}) + U_H^{(e)}(\mathbf{r}_i^{(e)}) - U_H^{(h)}(\mathbf{r}_i^{(e)}) + U_x^{(e)}(\mathbf{r}_i^{(e)}) \right) \phi_i(\mathbf{r}_i^{(e)}) = \epsilon_i \phi_i(\mathbf{r}_i^{(e)}), \quad (6)$$

$$-\frac{\hbar^2 \Delta_a}{2m_h} \psi_a(\mathbf{r}_a^{(h)}) + \left( U_{\text{shell}}(\mathbf{r}_a^{(e)}) + U_H^{(h)}(\mathbf{r}_a^{(h)}) - U_H^{(e)}(\mathbf{r}_a^{(h)}) + U_x^{(h)}(\mathbf{r}_a^{(h)}) \right) \psi_a(\mathbf{r}_a^{(h)}) = \epsilon_a \psi_a(\mathbf{r}_a^{(h)}).$$

Здесь  $\epsilon_i$  и  $\epsilon_a$  — одночастичные энергии электронов и дырок,  $U_H^{(e)}$  и  $U_H^{(h)}$  — хартриевские потенциалы. В случае системы, имеющей заполненные оболочки, они записываются в виде [67]

$$\begin{aligned} U_H^{(e)}(\mathbf{r}) &= \int V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho_e(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \\ U_H^{(h)}(\mathbf{r}) &= \int V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho_h(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \end{aligned} \quad (7)$$

где объемные концентрации электронов и дырок

$$\begin{aligned} \rho_e(\mathbf{r}) &= 2 \sum_i \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_i(\mathbf{r}), \\ \rho_h(\mathbf{r}) &= 2 \sum_a \phi_a^*(\mathbf{r}) \phi_a(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

вычисляются путем суммирования по всем заполненным одночастичным состояниям. При этом нелокальные обменные потенциалы  $U_x^{(e)}$  и  $U_x^{(h)}$ , соответственно, выражаются как

$$\begin{aligned} U_x^{(e)}(\mathbf{r}) \phi_i(\mathbf{r}) &= -q^2 \sum_j \int \frac{\phi_j^*(\mathbf{r}') \phi_i(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \phi_j(\mathbf{r}), \\ U_x^{(h)}(\mathbf{r}) \phi_a(\mathbf{r}) &= -q^2 \sum_b \int \frac{\phi_b^*(\mathbf{r}') \phi_a(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \phi_b(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (8)$$

Для описания многоэлектронных корреляций было использовано приближение случайных фаз с нелокальным обменным взаимодействием (ПСФО или RPAE), следуя работам [54, 55, 57, 58], в которых этот метод был обобщен для двухкомпонентной системы фермионов. В рамках этого подхода волновая функция возбужденного состояния  $|\Phi_k\rangle$  представляется в виде суперпозиции одночастичных возбуждений типа частица-вакансия

$$\begin{aligned} |\Phi_k\rangle &= \sum_{im} \left( X_{im}^{(k)} \hat{a}_m^+ \hat{a}_i + Y_{im}^{(k)} \hat{a}_i^+ \hat{a}_m \right) |\Phi_0\rangle + \\ &+ \sum_{as} \left( X_{as}^{(k)} \hat{a}_s^+ \hat{a}_a + Y_{as}^{(k)} \hat{a}_a^+ \hat{a}_s \right) |\Phi_0\rangle, \end{aligned} \quad (9)$$

где первое слагаемое описывает возбуждение электронной подсистемы, а второе слагаемое — дырочной,  $|\Phi_0\rangle$  обозначает основное состояние комплекса, операторы  $\hat{a}^+$  и  $\hat{a}$  есть одночастичные операторы рождения и уничтожения. Здесь и далее индексы  $i$  и  $m$  используются для обозначения заполненных и незаполненных одночастичных состояний электронной подсистемы, а индексы  $a$  и  $s$  — соответственно, для занятых и незанятых состояний дырочной подсистемы. Амплитудные коэффициенты  $X_{im}^{(k)}$ ,  $X_{as}^{(k)}$  (амплитуды «вперед во времени») и  $Y_{im}^{(k)}$ ,  $Y_{as}^{(k)}$  («назад во времени») определяют вклад соответствующей пары частица-вакансия в многочастичное возбужденное состояние (9).

Возбужденные состояния многочастичной системы с заполненными оболочками, обладающей сферической симметрией, в приближении LS-связи характеризуются полным угловым моментом  $L$  и его проекцией  $M$  [69], поэтому все одночастичные возбуждения «частица-вакансия» в суперпозиции (9) имеют ту же мультипольность.

Для описания оптических свойств электрон-дырочных комплексов достаточно рассмотреть только дипольные переходы из основного состояния  $|\Phi_0\rangle$  в возбужденные многочастичные состояния  $|\Phi_k\rangle$  с  $L = 1, M = 0$ .

В работах [54, 55, 57, 58] было показано, что амплитудные коэффициенты  $\mathbf{X}_e^{(k)}, \mathbf{X}_h^{(k)}$  и  $\mathbf{Y}_e^{(k)}, \mathbf{Y}_h^{(k)}$  в суперпозиции (9) определяются путем решения матричного уравнения ПСФО для двухкомпонентной системы:

$$\mathbf{U}\mathbf{Z}^{(k)} = \Omega_k\mathbf{Z}^{(k)}, \quad (10)$$

где  $\Omega_k$  — собственные числа матрицы

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(e)} & \mathbf{B}^{(e)} & \mathbf{C} & \mathbf{D} \\ -\mathbf{B}^{(e)*} & -\mathbf{A}^{(e)*} & -\mathbf{D}^* & -\mathbf{C}^* \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} & \mathbf{A}^{(h)} & \mathbf{B}^{(h)} \\ -\mathbf{D}^* & -\mathbf{C}^* & -\mathbf{B}^{(h)*} & -\mathbf{A}^{(h)*} \end{pmatrix}, \quad (11)$$

$$\mathbf{Z}^{(k)} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}_e^{(k)} \\ \mathbf{Y}_e^{(k)} \\ \mathbf{X}_h^{(k)} \\ \mathbf{Y}_h^{(k)} \end{pmatrix}.$$

Здесь элементы эрмитовых матриц  $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}, \mathbf{D}$  выражаются через одночастичные энергии  $\epsilon_i, \epsilon_a$  и кулоновские матричные элементы парного межчастичного взаимодействия

$$\langle \alpha\beta|V|\gamma\eta\rangle = \delta_{\sigma_\alpha\sigma_\gamma}\delta_{\sigma_\beta\sigma_\eta} \times \int \varphi_\alpha^*(\mathbf{r})\varphi_\beta^*(\mathbf{r}')V(\mathbf{r},\mathbf{r}')\varphi_\gamma(\mathbf{r})\varphi_\eta(\mathbf{r}')d\mathbf{r}d\mathbf{r}' \quad (12)$$

с одночастичными функциями, полученными в результате решения уравнений (6), где  $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  определен согласно (2).

Матрицы  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$  связывают между собой одночастичные возбуждения внутри электронной и дырочной подсистем, соответственно, и их вид не отличается от случая стандартного уравнения ПСФО для однокомпонентной системы зарядов [67]

$$\begin{aligned} A_{im,jn}^{(e)} &= \delta_{ij}\delta_{mn}(\epsilon_n - \epsilon_i) + \langle in|U|mj\rangle, \\ A_{as,bt}^{(h)} &= \delta_{ab}\delta_{st}(\epsilon_s - \epsilon_a) + \langle at|U|sb\rangle, \\ B_{im,jn}^{(e)} &= \langle ij|U|mn\rangle, \\ B_{as,bt}^{(h)} &= \langle ab|U|st\rangle. \end{aligned} \quad (13)$$

Матричные элементы в (13) включают в себя как прямое (хартриевское), так и нелокальное обменное взаимодействие

$$\langle \alpha\beta|U|\gamma\eta\rangle = 2\langle \alpha\beta|V|\gamma\eta\rangle + \langle \alpha\beta|V|\eta\gamma\rangle, \quad (14)$$

где множитель 2 перед прямой компонентой в (14) появляется в результате суммирования по спиновым переменным.

Матрицы  $\mathbf{C}$  и  $\mathbf{B}$  связывают между собой возбуждения электронной и дырочной подсистем и поэтому содержат только компоненты прямого кулоновского взаимодействия

$$\begin{aligned} C_{im,as} &= -2\langle is|V|ma\rangle, \\ D_{im,as} &= -2\langle ia|V|ms\rangle. \end{aligned} \quad (15)$$

Положительные собственные числа  $\Omega_k$  есть энергии переходов между основным состоянием  $|\Phi_0\rangle$  и коррелированными возбужденными состояниями  $|\Phi_k\rangle$  (9).

Полученные при решении уравнений (10)–(11) спектры энергий возбужденных состояний и соответствующие волновые функции позволяют описывать процессы, связанные с возбуждением системы под действием различных внешних воздействий. Так, отклик системы на внешнее электромагнитное поле определяется спектром дипольных возбуждений. Силы осцилляторов  $f_k$  для дипольных переходов между основным и  $k$ -м возбужденным состоянием равны:

$$f_k = 2\mu D_k^2\Omega_k, \quad (16)$$

где  $\mu = m_e m_h / (m_e + m_h)$  — приведенная масса электрон-дырочной пары. Силы осцилляторов удовлетворяют правилу сумм Томаса–Райха–Куна [67],  $\sum_k f_k = N$ .

Дипольные матричные элементы  $D_k$  (в калибровке длины) вычисляются путем суммирования по всем одночастичным возбуждениям [55, 57, 58],

$$\begin{aligned} D_k &= \sum_{im} \left( X_{im}^{(k)} d_{im} + Y_{im}^{(k)} d_{mi} \right) + \\ &+ \sum_{as} \left( X_{as}^{(k)} d_{as} + Y_{as}^{(k)} d_{sa} \right), \end{aligned} \quad (17)$$

где  $d_{\alpha\beta} = \langle \alpha|z|\beta\rangle$  — одночастичные дипольные амплитуды для пары частица-вакансия для электронов и дырок, соответственно, а амплитудные коэффициенты  $\mathbf{X}_e^{(k)}, \mathbf{X}_h^{(k)}$  и  $\mathbf{Y}_e^{(k)}, \mathbf{Y}_h^{(k)}$  нормированы в соответствии с условием

$$\begin{aligned} \sum_{im} \left( |X_{im}^{(k)}|^2 - |Y_{im}^{(k)}|^2 \right) + \\ + \sum_{as} \left( |X_{as}^{(k)}|^2 - |Y_{as}^{(k)}|^2 \right) = 1. \end{aligned} \quad (18)$$

Важно отметить, что движение центра масс всей системы в целом также является дипольным возбуждением и при непосредственном численном решении уравнения (10) его невозможно отделить от

относительного движения электронов и дырок в системе их центра масс.

Чтобы исключить движение центра масс из спектра возбуждений системы, что оказалось особенно важным при малых значениях высоты барьера  $U_0$ , был применен метод, основанный на использовании проекционных операторов [54, 55, 57, 58]. Идея метода состоит в переходе от базисного набора одночастичных возбуждений в разложении (9)  $|\alpha\beta\rangle = \hat{a}_\alpha^+ \hat{a}_\beta |\Phi_0\rangle$  к новому базису дипольных возбуждений  $|\gamma\eta\rangle$ , не содержащих движения центра масс системы,

$$|\gamma\eta\rangle = \hat{P}_{\text{CM}} |\alpha\beta\rangle. \quad (19)$$

Здесь  $\hat{P}_{\text{CM}}$  — проекционный оператор, матричные элементы которого равны

$$P_{\gamma\eta, \alpha\beta}^{\text{CM}} = \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\eta} - \frac{P_{\gamma\eta} P_{\alpha\beta}}{Q_{\text{CM}}}, \quad (20)$$

где знаменатель

$$Q_{\text{CM}} = \sum_{in} |p_{in}^{(e)}|^2 + \sum_{as} |p_{as}^{(h)}|^2,$$

а  $p_{\alpha\beta} = \langle \alpha | \hat{p}_z | \beta \rangle$  — одночастичные матричные элементы оператора импульса.

Волновая функция  $k$ -го дипольного возбужденного состояния  $\tilde{\Phi}_k$  относительно неподвижного центра масс теперь по-прежнему записывается в виде разложения (9), но уже по новому базису одночастичных дипольных возбуждений (19) с новыми амплитудными коэффициентами  $\tilde{X}_{im}^{(k)}$ ,  $\tilde{Y}_{im}^{(k)}$  и  $\tilde{X}_{as}^{(k)}$ ,  $\tilde{Y}_{as}^{(k)}$ . Их значения, а также энергия возбуждения  $\Omega_k$ , определяются как компоненты собственного вектора и соответствующее собственное число матрицы  $\tilde{\mathbf{U}} = \mathbf{P}_{\text{CM}} \mathbf{U} \mathbf{P}_{\text{CM}}$ , полученной в результате действия проекционного оператора на исходную матрицу (11).

### 3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

При проведении расчетов спектров поглощения полупроводниковых кристаллов типа «ядро-оболочка» были выбраны сферически симметричные электронно-дырочные комплексы с радиусами ядра  $r_{\text{core}} = 75$  ат.ед.  $\approx 4$  нм и оболочки  $r_{\text{shell}} = 150$  ат.ед.  $\approx 8$  нм, соответственно. В дальнейшем условимся называть носители материала ядра электронами, а материала оболочки, соответственно, дырками, как, например, в гетероструктурах типа CdSe/CdTe [45] или CdS/ZnSe [40]. Поскольку цель работы состоит в исследовании зави-

симости оптических свойств системы от одного конкретного параметра, а именно от высоты барьера  $V_c = V_v = U_0$  в (4), (5), для численных расчетов для модельной гетероструктуры были использованы значения  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 1$  и эффективные массы  $m_e = 0.2m_0$  и  $m_h = 0.5m_0$  для электронов и дырок, соответственно, где  $m_0$  — масса свободного электрона.

В качестве объекта исследования были выбраны структуры, содержащие  $N = 50$  пар частиц. Это соответствует средней концентрации электрон-дырочных пар  $\langle n \rangle = 3N/4\pi r_{\text{shell}} \sim 0.9 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ , что по порядку величины близко к средней концентрации носителей в экспериментах [29, 30]. Соответствующий эффективный радиус Вигнера-Зейца, т.е. среднее расстояние между парами носителей в предельном случае отсутствия барьера, оказался равным  $r_s = (3/4\pi \langle n \rangle)^{-1/3} = 1.7$  нм, что позволяет при описании движения частиц и дырок использовать приближение огибающей функции [70, 71], применение которого оправдано существенно большим радиусом  $r_s$  по сравнению с типичными значениями постоянной решетки нанокристаллов [64]. По этой же причине мы пренебрегаем возможной непараболическостью и анизотропией валентной зоны и зоны проводимости материалов и используем модельные эффективные массы  $m_e$  и  $m_h$ , соответствующие изотропным и параболическим зонам, а также описываем исследуемые наносистемы как сферически симметричные, для которых применима модель ступенчатого потенциала (4), (5).

Проведенные сравнительные расчеты основного состояния двухкомпонентных систем при различных значениях  $U_0$  показали, что даже в предельном случае  $U_0 \rightarrow 0$ , то есть в приближении свободной электронно-дырочной капли [59, 64], ее наименьшая полная энергия соответствует конфигурации обеих подсистем с замкнутыми оболочками и сферически симметричным распределением объемной концентрации электронов и дырок  $\rho_e(r)$  и  $\rho_h(r)$ . Для сферически-симметричных подсистем с замкнутыми оболочками и изотропными угловыми зависимостями  $\rho(r)$  совокупные индексы « $i$ » и « $a$ » у одночастичных волновых функций  $\phi_i$  и  $\phi_a$  в (6) обозначают набор квантовых чисел  $(n, l, m, \sigma)$ , где  $n$  — радиальное квантовое число,  $l$  и  $m$  — угловой момент и его проекция,  $\sigma$  — проекция спина, а сами волновые функции записываются как произведение радиальной, угловой и спиновой компонент [72],

$$\phi_{nlm\sigma}(\mathbf{r}) = \frac{P_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi) \chi_\sigma. \quad (21)$$

При заданных параметрах для  $N = 50$  во всем диапазоне изменения высоты барьера наиминшей полной энергии соответствует конфигурация с полностью заполненными квантовыми оболочками  $1s^2 2p^6 3d^{10} 4f^{14} 5g^{18}$  для обеих подсистем, то есть при максимально возможных значениях орбитального момента для каждого главного квантового числа, как это наблюдалось, например, и в случае однокомпонентных нанокристаллов с поверхностным типом легирования [29, 30, 33, 34].

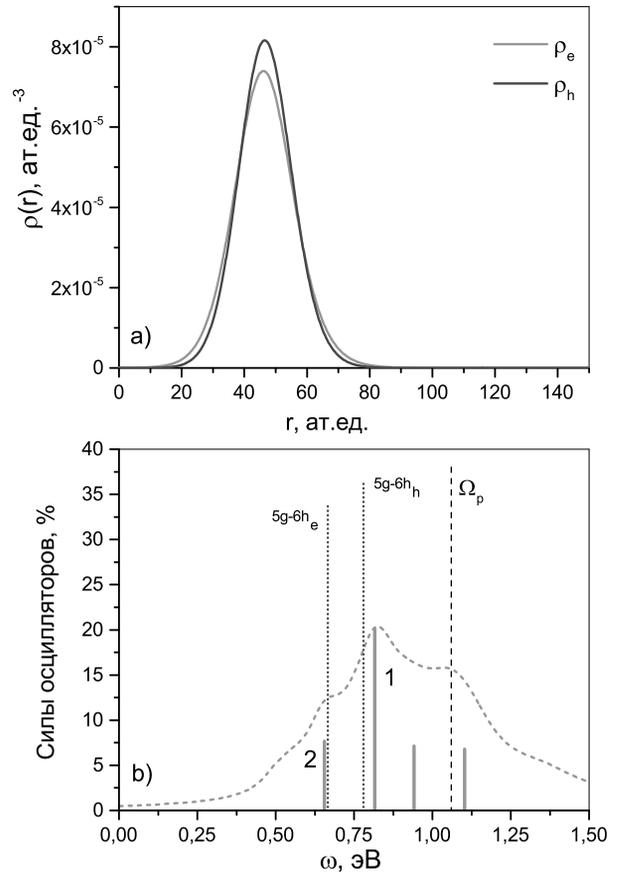
Силы осцилляторов (16) были найдены в результате решения уравнения ПСФО (10)–(11). Для численных расчетов спектров фотопоглощения был использован метод Би-сплайнов (*B-splines*) [73, 74], основанный на замене одночастичных состояний непрерывного спектра дискретным набором псевдосостояний. Радиальные части одночастичных волновых функций  $P_{nl}(r)$  представляются в виде линейной комбинации кусочно-непрерывных полиномов, заданных на достаточно большом конечном радиальном интервале  $[0, R_{\max}]$ ,

$$P_{nl}(r) = \sum_{i=2}^{N_{\text{spl}}-1} C_i B_{i,k}(r), \quad (22)$$

где  $N_{\text{spl}}$  — полное число сплайнов порядка  $k$ . При этом функции  $P_{nl}(r)$  удовлетворяют граничным условиям  $P_{nl}(0) = P_{nl}(r_{\text{shell}}) = 0$ , то есть, согласно (4), (5), фермионная система предполагается помещенной в сферическую потенциальную яму радиуса  $r_{\text{shell}}$  с бесконечно высокими стенками. При этом для обеспечения необходимой точности результатов ( $\sim 10^{-5}$ ) для правила сумм были использованы 50 сплайнов 7-го порядка.

Вначале были рассчитаны распределения объемной плотности заряда для электронной и дырочной компонент в предельном случае  $U_0 = 0$ , то есть для электронно-дырочной капли, содержащей  $N = 50$  частиц обоого сорта, связанных между собой только межчастичным взаимодействием. Результаты расчета в приближении Хартри–Фока (6) приведены на рис. 1 *a*. Из графика видно, что полученные функции распределения имеют вид компактной радиально-симметричной структуры, лишь незначительно различаясь из-за разности эффективных масс электронов и дырок.

Распределения сил осцилляторов, также для сравнения посчитанные в обоих приближениях, показаны на рис. 1 *b* вертикальными линиями. Полученные распределения сил осцилляторов свидетельствуют о наличии в оптическом спектре комплекса гигантского дипольного резонанса, связанного, как



**Рис. 1.** *a* — Распределения плотности заряда электронов  $\rho_e$  и дырок  $\rho_h$  в двухкомпонентной системе, содержащей  $N = 50$  пар частиц при  $U_0 = 0$ . *b* — Распределения сил осцилляторов (17) (в % от правила сумм) в приближении случайных фаз с обменом (ПСФО). Огибающая сечения фотопоглощения показана пунктирными линиями. Тонкими вертикальными штриховыми линиями отмечено положение  $\Omega_p$  (23) и частоты двух основных одночастичных переходов  $5g - 6h$  для электронной и дырочной подсистем

было продемонстрировано в работе [58], с возбуждением поверхностных плазмонных колебаний.

Для сравнения на графике также показано положение частоты гармонических колебаний центра масс системы в адиабатическом приближении [31, 58],

$$\Omega_p = \sqrt{\frac{4\pi e^2 \hbar^2}{3\mu N} \int \rho_e(\mathbf{r}) \rho_h(\mathbf{r}) d\mathbf{r}}. \quad (23)$$

На этом же графике отмечены положения частот основных одночастичных дипольных переходов для электронной и дырочной подсистем с наибольшей силой осцилляторов, соответственно,  $5g - 6h_e$  и  $5g - 6h_h$ .

Оказалось, что преобладающая доля сил осцилляторов (84%) приходится на энергии выше потенциала ионизации, что приводит к сильной фрагментации линии плазмонного резонанса, частота которого попадает в область непрерывного спектра. Эта особенность плазмонного резонанса в электронно-дырочных каплях отличает его от аналогичного возбуждения в системе делокализованных электронов в металлических кластерах, где положение плазмонного резонанса находится ниже потенциала ионизации [9, 10]. Непосредственное исследование механизмов уширения линий в оптических спектрах наноразмерных объектов, которым было уделено внимание авторами ряда публикаций [75–80], не является целью данной работы.

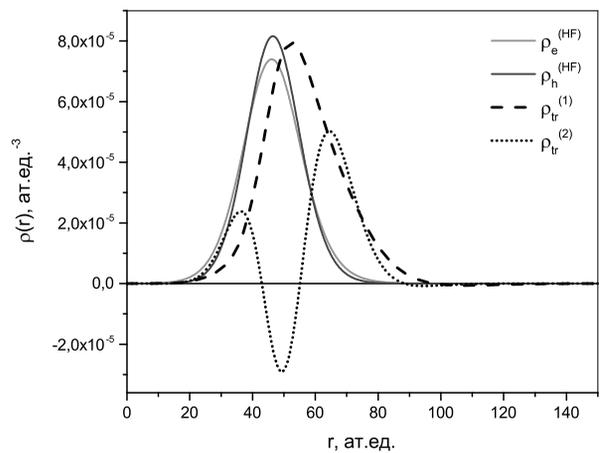
Поэтому для получения соответствующих сечений фотопоглощения наборы рассчитанных дискретных сил осцилляторов (16) нами были заменены лоренцевыми профилями, ширина которых на построенных тонкими пунктирными линиями графиках была выбрана как  $\Gamma_k = 0.1\Omega_k$  для  $k$ -го дипольного перехода с частотой  $\Omega_k$ .

Несмотря на сильную фрагментацию резонансной линии, плазменные колебания в двухкомпонентной системе даже в отсутствие разделительного барьера можно считать гармоническими. Внешнее электромагнитное поле воздействует непосредственно на центры масс электронов и дырок и не затрагивает их внутреннее движение. В свою очередь, расщепление чисто гармонической плазмонной моды, соответствующей относительному движению центров масс электронной и дырочной подсистем с частотой колебаний  $\Omega_p$ , происходит путем смешивания плазмонной моды и внутренних возбуждений частиц комплекса [57, 58].

Каждое возбужденное состояние  $\Phi_k$  (9), полученное в результате, в общем случае содержит в себе вклады практически всех одночастичных переходов  $\phi_i \rightarrow \phi_m$  и  $\phi_a \rightarrow \phi_n$ , при этом отличаясь их амплитудными коэффициентами и, как следствие, характером движения участвующих частиц. Природа конкретной  $k$ -й спектральной линии может быть проанализирована путем исследования соотношений ее отдельных амплитуд  $X^{(k)}$  и  $Y^{(k)}$ , а также соответствующей плотности переходов, которая определяется как

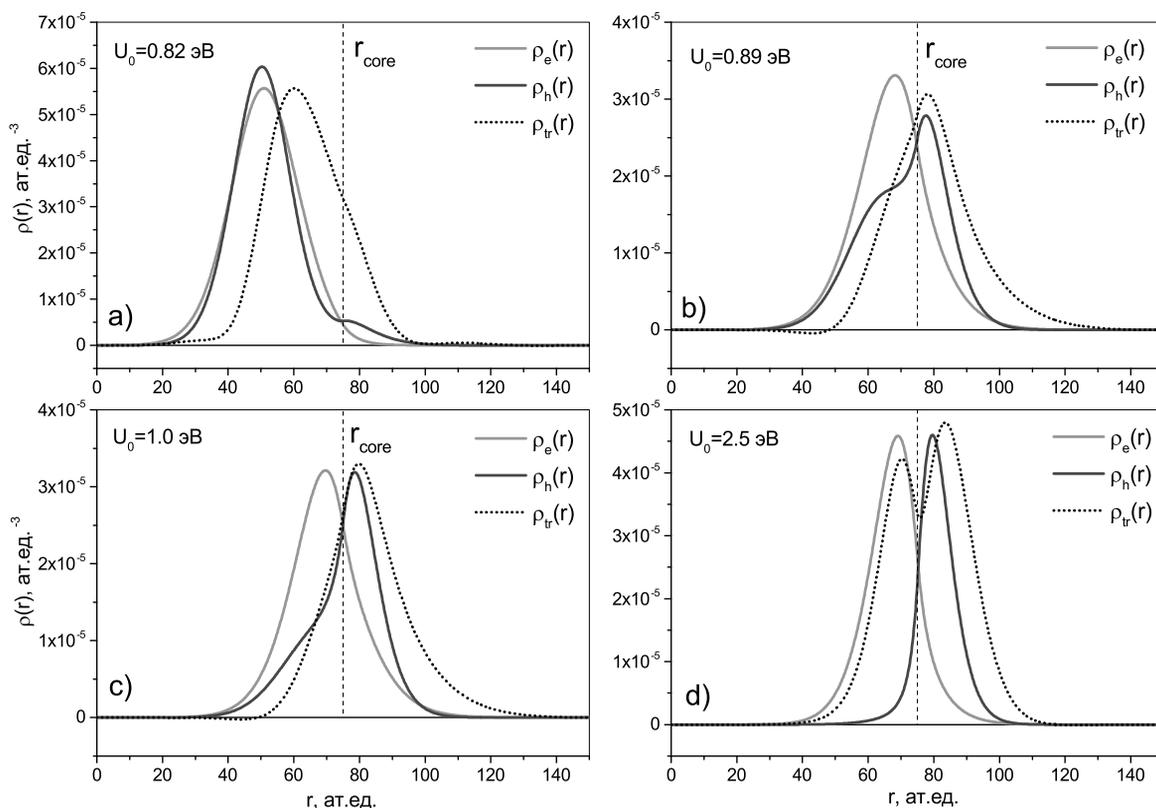
$$\begin{aligned} \rho_{tr}^{(k)}(\mathbf{r}) &= \langle \Phi_k | \delta\rho(\mathbf{r}) | \Phi_0 \rangle = \\ &= \sum_{im} \left( X_{im}^{(k)} \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_m(\mathbf{r}) + Y_{im}^{(k)} \phi_i(\mathbf{r}) \phi_m^*(\mathbf{r}) \right) + \\ &+ \sum_{an} \left( X_{an}^{(k)} \phi_a^*(\mathbf{r}) \phi_n(\mathbf{r}) + Y_{an}^{(k)} \phi_a(\mathbf{r}) \phi_n^*(\mathbf{r}) \right). \end{aligned} \quad (24)$$

Для сравнительного анализа были выбраны две основные линии в спектре, отмеченные на графике рис. 1 *b* цифрами «1» и «2». На рис. 2 приведены соответствующие радиальные распределения плотности переходов на фоне плотности электронной и дырочной компонент основного состояния системы. Из графиков видно, что для дипольной моды «1» с энергией  $\Omega_1 \approx 0.82$  эВ, на которую приходится около 20% суммы сил осцилляторов, максимум плотности переходов приходится на область внешней границы электронно-дырочного комплекса, что свидетельствует о преимущественно радиальном и при этом синфазном характере движения частиц в этом колебательном процессе. Напротив, для моды «2» с  $\Omega_2 \approx 0.66$  эВ, содержащей около 7.5% правила сумм, распределение плотности переходов имеет один максимум в объеме системы и, таким образом, колебания в этом возбужденном состоянии не являются поверхностной плазмонной модой.



**Рис. 2.** Радиальные распределения плотности дипольных переходов  $\rho_{tr}(r)$  (в относительных единицах) для возбужденных состояний, соответствующих линиям «1» и «2» на графике рис. 1(b), на фоне распределения зарядовой плотности электронной и дырочной компонент

Чтобы выявить принципиальное различие этих двух мод по своему характеру, также был проведен анализ соответствующих амплитуд «вперед-» и «назад-во-времени». Для коллективных возбуждений плазмонного типа характерны близкие по порядку величины значения  $X$  и  $Y$ , в то время, как для других мод наблюдается соотношение  $X \gg |Y|$ . Большой вклад амплитуды «назад-во-времени» свидетельствует о значительном смешивании электрон-дырочных состояний и существенно коллективном



**Рис. 3.** Распределения плотности заряда электронов и дырок в двухкомпонентной системе, содержащей  $N = 50$  пар частиц при различных значениях высоты барьера  $U_0$  и соответствующие радиальные распределения плотности переходов для плазмонной моды

характере возбуждения. Напротив, малые значения элементов  $Y$  характерны для преимущественно одночастичных состояний, для которых межчастичные корреляции практически не играют роли. Оказалось, что возбужденное состояние, сила осциллятора которого соответствует линии «1» в спектре, представляет собой линейную комбинацию (9), в которой доминирует пара двух дипольных переходов НОМО–LUMO  $5g \rightarrow 6h$  между электронными и дырочными одночастичными состояниями с бескорневыми радиальными волновыми функциями  $P_{nl}(r)$  и всеми возможными проекциями углового момента. При этом значения  $|Y_{5g \rightarrow 6h}| \approx 0.3$  для обеих компонент, а соотношения  $|Y|/X$  для этих переходов составляют  $\sim 0.6$  и  $\sim 0.7$ , соответственно, для электронной и дырочной подсистем. Вклад остальных одночастичных состояний остается незначительным и не оказывает заметного влияния на характер этого многочастичного возбуждения.

Таким образом, колебательная мода с частотой 0.82 эВ обладает всеми признаками поверхностного плазмонного резонанса «традиционного» транс-

ляционного типа, при котором возбуждены преимущественно радиальные степени свободы. Напротив, среди коэффициентов  $Y$ , соответствующих линии «2», отсутствуют значения, превышающие  $10^{-2}$ , и, хотя суммирование (9) включает в себя сравнимые по величине вклады нескольких одночастичных дипольных переходов, эта мода не может быть отнесена к коллективным плазмонным возбуждениям.

Следовательно, в пределе низких значений потенциального барьера между ядром и оболочкой в электронно-дырочном комплексе под воздействием внешнего электромагнитного поля возбуждается коллективная гармоническая мода, спектральная линия которой в результате межчастичных взаимодействий оказывается уширена и фрагментирована на отдельные линии в спектре фотопоглощения, основной пик среди которых сохраняет свойства дипольного поверхностного плазмона трансляционного типа.

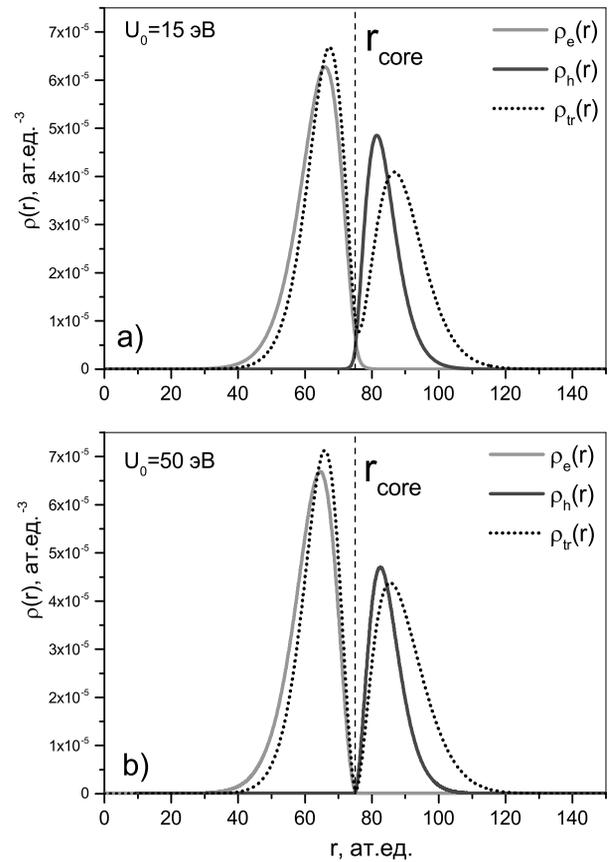
После того, как были выявлены критерии, по которым определяется плазмонная мода в спектре возбужденных состояний двухкомпонентной

электронно-дырочной системы в отсутствие потенциального барьера между ядром и оболочкой, появилась возможность исследовать влияние, которое оказывает потенциальный барьер на оптические свойства квантовой точки в зависимости от его высоты. Расчеты показали, что изменение высоты барьера даже в сравнительно узком диапазоне ее значений может привести к кардинальным изменениям в распределении плотности зарядов в системе и, в итоге, в спектре ее дипольных возбуждений.

Из результатов проведенных вычислений следует, что при относительно малых значениях  $U_0 \lesssim 0.4$  эВ влияние барьера на структуру электронно-дырочного комплекса практически не сказывается. Заметные качественные изменения начинаются при  $U_0 \sim (0.5-0.6)$  эВ. На рис. 3 для примера представлены распределения электронной и дырочной плотности в объеме квантовой точки для различных значений параметра  $U_0$ . Для сравнения также показаны соответствующие распределения плотности дипольных переходов для плазмонной линии, доминирующей в спектре возбужденных состояний.

Из приведенных графиков видно, что даже относительно незначительное изменение высоты барьера в интервале (0.82–0.89) эВ вызвало заметное перераспределение плотности заряда дырочной подсистемы и, как результат, смещение плотности переходов к границе между ядром и оболочкой. Помимо этого изменился сам характер распределения плотности переходов. Если при  $U_0 = 0.82$  эВ, как и в случае отсутствия барьера, максимум плотности переходов приходился на внешнюю границу распределения зарядовой плотности, что свидетельствует о преобладании в колебательном процессе радиально-направленного движения, то уже при  $U_0 = 0.89$  эВ наблюдается заметное перекрытие функций распределения плотностей зарядов и дипольных переходов, что косвенно свидетельствует о возбуждении не только радиальных, но и угловых (вращательных) степеней свободы вблизи границы ядра. Дальнейшее увеличение высоты барьера, как видно из графиков, приводит к постепенному пространственному разделению электронов и дырок в системе. Так при  $U_0 = 2.5$  эВ положительные и отрицательные носители зарядов уже почти полностью разделены, а в распределении плотности переходов у плазмона появились отдельные «электронный» и «дырочный» максимумы. При этом функция распределения плотности переходов в значительной степени повторяет распределение плотности зарядов, в особенности это заметно для электронной подсистемы, что

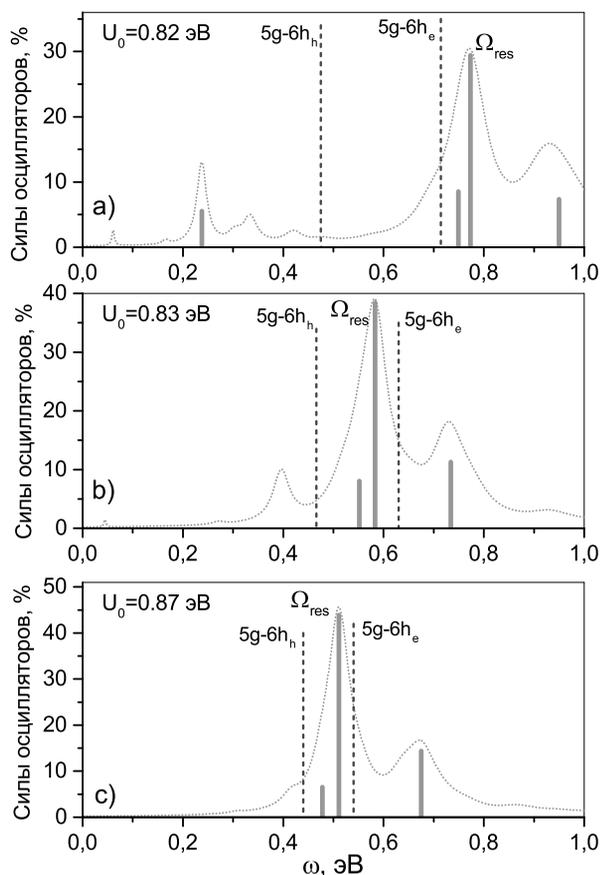
свидетельствует о преобладании в плазмонной моде колебаний вращательного типа.



**Рис. 4.** Радиальные распределения плотности дипольных переходов  $\rho_{tr}(r)$  (в относительных единицах) для плазмонной моды на фоне распределения зарядовой плотности электронной и дырочной компонент для значений высоты барьера  $U_0 = 15$  эВ (а) и 50 эВ (б)

На рис. 4 (а, б) в качестве иллюстрации изображены распределения плотности зарядов и плотности переходов в пределе больших значений высоты барьера  $U_0 = 15$  эВ и  $U_0 = 50$  эВ. Вид функции распределения плотности переходов в электронной подсистеме практически в точности воспроизводит распределение плотности заряда, из чего следует, что в колебаниях плазмонной моды радиальное движение электронов заморожено и возбуждены только угловые (вращательные) степени свободы. В то же время для дырочной подсистемы ситуация несколько иная, в ее плазмонных колебаниях все еще присутствуют как угловые, так и радиальные степени свободы. Тем не менее, судя по тому, что при увеличении  $U_0$  от 15 до 50 эВ функции распределения практически не изменились, этот барьер можно условно

считать бесконечно высоким, при котором электроны и дырки полностью пространственно разделены.



**Рис. 5.** Распределения сил осцилляторов (17) (в % от правила сумм) при значениях высоты потенциального барьера 0.82 (a), 0.83 (b) и 0.87 эВ (c). Огибающие соответствующих сечений фотопоглощения показаны тонкими пунктирными линиями. Штриховыми линиями отмечены частоты двух основных одночастичных переходов  $5g - 6h$  для электронной и дырочной подсистем

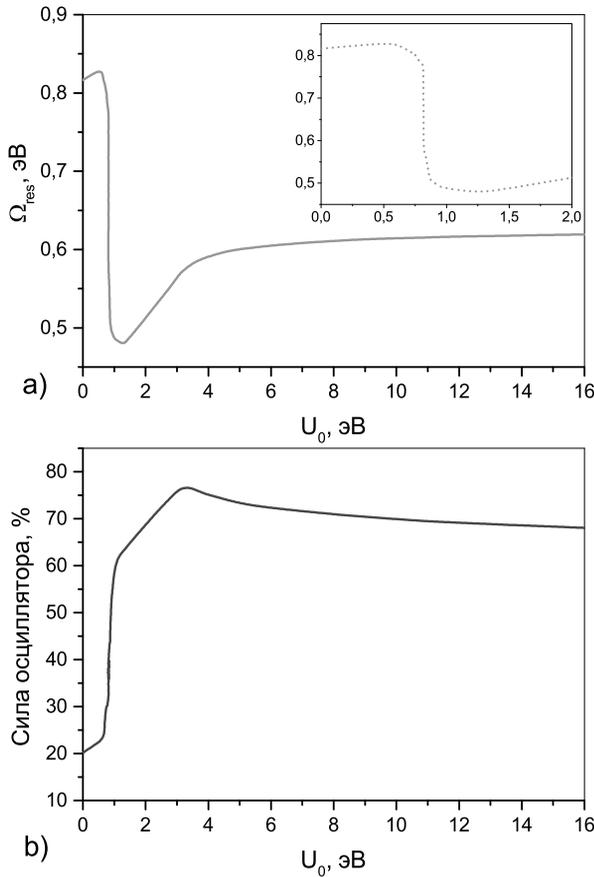
Перестройка структуры электрон-дырочного комплекса при изменении высоты барьера между ядром и оболочкой наноразмерной квантовой точки в свою очередь приводит к изменению всего спектра возбужденных состояний системы, в особенности положения доминирующей линии плазмонного резонанса. На рис. 5 приведены распределения сил осцилляторов, рассчитанные в рамках ПСФО для трех значений высоты потенциального барьера в интервале от 0.82 до 0.87 эВ, в котором наблюдалось наиболее значительное уменьшение перекрытия плотностей заряда электронной и дырочной подсистем и указывало на качественное изменение структуры всего комплекса. Как и в

ситуации с  $U_0 = 0$ , на графиках также были построены сечения фотопоглощения при помощи лоренцевых профилей, ширина которых в данном случае была выбрана как  $\Gamma_k = 0.05\Omega_k$ , а также показаны положения основных линий одночастичных переходов.

Из графиков рис. 5 a-c видно, что во всех случаях в сечениях фотопоглощения, показанных тонкими сплошными линиями присутствует доминирующий плазмонный пик, частота которого на рисунках отмечена как  $\Omega_{res}$ . При этом, как следует из рис. 5 a, b, увеличение высоты барьера всего на 10 мэВ приводит к смещению резонансной линии с 0.77 до 0.58 эВ, то есть практически на 25 %. Также наблюдается заметное перераспределение спутных линий в спектре, которые, как и в случае  $U_0 = 0$ , мы не причисляем к возбуждениям плазмонного типа, несмотря на то, что на их долю по-прежнему приходится заметная часть сил осцилляторов.

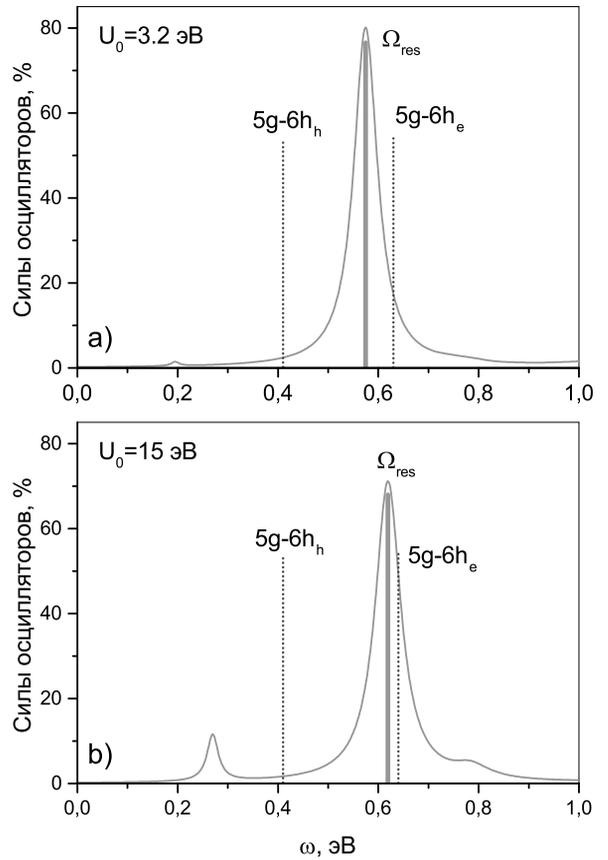
Как видно из рис. 6 a, на котором представлена зависимость частоты плазмонного пика от высоты потенциального барьера в широком диапазоне изменения  $U_0$ , именно на интервал 0.6 до 0.9 эВ, в котором наблюдалось наиболее существенное уменьшение перекрытия плотностей электронов и дырок, приходится и область наиболее быстрого изменения плазмонной частоты, вызванного включением вращательных степеней свободы в коллективном движении частиц. При дальнейшем повышении барьера происходит постепенный переход резонансной моды от дипольного плазмона трансляционного типа к вращательному поверхностному плазмону в пределе высоких значений  $U_0$ , при которых электроны и дырки пространственно разделены барьером, как это видно на рис. 4 a, b. Этот факт также подтверждается приведенной на рис. 6 b соответствующей зависимостью силы осциллятора плазмонной моды, которая сперва быстро возрастает по мере включения вращательных колебаний и достигает своего максимума при  $U_0 \sim 3.2$  эВ, когда в движении участвуют одновременно и угловые и радиальные степени свободы, а затем при постепенном замораживании последних стремится к асимптотическому пределу  $\sim 66\%$ , как у поверхностного плазмона чисто вращательного типа [33, 34].

На рис. 7 в качестве примера приведены спектры возбужденных состояний электронно-дырочного комплекса при  $U_0 = 3.2$  эВ (a) и 15 эВ (b). В обоих случаях в сечении фотопоглощения доминирует один основной плазмонный пик, частота и сила осциллятора которого определяется



**Рис. 6.** *a* — Зависимость частоты плазмонного резонанса  $\Omega_{\text{res}}$  от высоты потенциального барьера  $U_0$  в приближении ПСФО. На вставке отдельно показана эта же зависимость в области наиболее существенного ее изменения. *b* — Зависимость силы осциллятора плазмонной моды (в % от правила сумм) от высоты потенциального барьера

согласно зависимости из рис. 6. При этом при  $U_0 = 3.2$  эВ плазменная мода включает в себя 80% сил осцилляторов, в то время, как сателлитные линии, соответствующие одночастичным переходам практически отсутствуют. При  $U_0 = 15$  эВ сила осциллятора поверхностного плазмона составляет 67% правила сумм, что соответствует чисто вращательному типу возбуждения. Важно также отметить, что отношение резонансных частот главных плазмонных линий при  $U_0 = 15$  эВ и в предельном случае  $U_0 = 0$  эВ оказалось равным 0.83, что очень близко к отношению плазмонных частот в тонком сферическом слое и равномерно заряженном шаре, равному  $\sqrt{2/3}$ , что также косвенно подтверждает трансформацию плазмонной моды из трансляционной во вращательную при изменении высоты барьера между ядром и оболочкой двух-



**Рис. 7.** Распределения сил осцилляторов (17) при (*a*)  $U_0 = 3.2$  эВ (*b*)  $U_0 = 15$  эВ. Огибающие соответствующих сечений фотопоглощения показаны тонкими сплошными линиями. Тонкими пунктирными линиями отмечены частоты двух основных одночастичных переходов  $5g - 6h$  для электронной и дырочной подсистем

компонентной квантовой точки с гетеропереходом второго рода.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В представленной работе теоретически исследованы оптические свойства сферически-симметричных наноразмерных квантовых точек типа «ядро-оболочка» с гетеропереходом второго рода, содержащих  $N = 50$  пар электронов и дырок. Потенциальный барьер, разделяющий между собой внутреннюю и наружную части системы, был описан в рамках модели ступенчатого потенциала. Для описания процессов взаимодействия носителей заряда между собой и с внешним электромагнитным полем был использован теоретический подход, основанный на приближении Хартри-Фока и приближении случайных фаз с обменом. Оказалось, что

по мере повышения высоты барьера кардинальным образом меняется распределение плотностей заряда электронов и дырок, что наглядно проявилось в резком уменьшении их перекрытия при достижении некоторого порогового значения потенциала.

Важно отметить, что перестройка структуры комплекса происходит в сравнительно узком диапазоне значений высоты барьера.

Дальнейшее увеличение его высоты обеспечивает эффективное пространственное разделение положительных и отрицательных зарядов, формируя двухкомпонентную систему в виде двойного заряженного слоя вблизи границы раздела.

В приближении случайных фаз с обменом был исследован спектр возбужденных состояний двухкомпонентной системы при различных значениях высоты потенциально барьера, разделяющего внутреннюю и наружную части системы. Было продемонстрировано, что свойства оптических спектров определяются наличием в них гигантского дипольного резонанса, связанного с возбуждением коллективных плазмонных колебаний. При этом оказалось, что характер колебательного движения частиц при плазмонном резонансе принципиально меняется при увеличении высоты барьера в сравнительно узком диапазоне его значений с радиального (трансляционного) на вращательное, что сопровождается резким изменением резонансной частоты, сохраняя гармонический характер колебаний носителей заряда. Важно отметить, что высота барьера, при которой происходит «переключение» плазмонных колебаний с радиальных на вращательные определяется только пространственным распределением плотности носителей заряда и их концентрацией, что характерно для гармонических коллективных мод в коррелированных многочастичных ансамблях.

## ЛИТЕРАТУРА

1. В.В.Климов, *Наноплазмоника*, Москва, Физматлит (2009).
2. *Quantum Plasmonics*, ed. by S. I. Bozhevolniy et al., Springer International Publishing, Switzerland (2016).
3. *Plasmonics. From Basics to Advanced Topics*, ed. by S. Enoch, N. Bonod, Springer Series in Optical Sciences **167**, Berlin, Springer Verlag (2012).
4. M. S. Tame, K. R. McEnery, S. K. Ozdemir et al., *Nature Physics* **9**, 329 (2013).
5. J. A. Scholl, A. L. Koh, and J. A. Dionne, *Nature* **483**, 421 (2012).
6. M. Brack, *Rev. Mod. Phys.* **65**, 667 (1993).
7. M. Harb, F. Rabilloud, D. Simon et al., *J. Chem. Phys.* **129**, 194108 (2008).
8. F. Xuan and C. Guet, *Phys. Rev. A* **94**, 043415 (2016).
9. U. Kreibig and M. Vollmer, *Optical Properties of Metallic Clusters*, Springer Series in Materials Science **65**, Berlin, Springer Verlag (1995).
10. U. Kreibig and P. Zacharias, *Z. Physic* **231**, 128 (1970).
11. I. Kriegel, F. Scotognella, and L. Manna, *Physics Reports* **674**, 1 (2017).
12. *Nanocrystal Quantum Dots*, ed. by V. I. Klimov, CRC press (2010).
13. R. C. Monreal, T. J. Antosiewicz, and S. P. Appel, *New J. of Physics* **15**, 083044 (2013).
14. F. Scotognella, G. Della Valle, A. R. S. Kandada et al., *Eur. Phys. J. B* **86**, 154 (2013).
15. Y. Xie, L. Carbone, C. Nobile et al., *ACS Nano* **7**, 7352 (2013).
16. A. L. Routzahn, S. L. White, L.-K. Fong et al., *Isr. J. Chem.* **52**, 983 (2012).
17. J. M. Luther, P. K. Jain, and T. Ewers et al., *Nature Materials* **10**, 361 (2011).
18. J. A. Faucheaux, A. L. D. Stanton, and P. K. Jain, *J. Phys. Chem. Lett.* **5**, 976 (2014).
19. S. D. Lounis, E. L. Runnerstrom, A. Bergerud et al., *J. Am. Chem. Soc.* **136**, 7110 (2014).
20. T. O. Cheche, V. Barna, and I. Stamatina, *J. of Optoelectronics and Advanced Materials* **15**, 615 (2013).
21. M. A. El-Sayed, *Acc. Chem. Res.* **37**, 326 (2004).
22. S.-W. Hsu, K. On, and A. T. Rao, *J. Amer. Chem. Soc.* **133**, 19072 (2011).
23. X. Liu and M. T. Swihart, *Chem. Soc. Rev.* **43**, 3908 (2014).
24. G. Garcia, R. Buonsanti, E. L. Runnerstrom et al., *Nano Lett.* **11**, 4415 (2011).

25. M. Kanehara, H. Koike, T. Yoshinaga, and T. Teranishi, *J. Am. Chem. Soc.* **131**, 17736 (2009).
26. D. J. Rowe, J. S. Jeong, K. A. Mkhoyan, and U. R. Kortshage, *Nano Lett.* **13**, 1317 (2013).
27. Zh. Sun and B. Zhao, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 221106 (2007).
28. H. Zhang, V. Kulkarni, E. Prodan et al., *J. Phys. Chem. C* **118**, 16035 (2014).
29. A. M. Schimpf, N. Thakkar, C. E. Gunthardt et al., *ACS Nano*, **8**, 1065 (2014).
30. A. M. Schimpf, C. E. Gunthardt, J. D. Rinehart et al., *J. Am. Chem. Soc.* **135**, 16569 (2013).
31. L. G. Gerchikov, C. Guet, and A. N. Ipatov, *Phys. Rev. A* **66**, 053202 (2002).
32. A. N. Ipatov, L. G. Gerchikov, and C. Guet, *J. Comp. Mat. Sci.* **35**, 347 (2006).
33. A. N. Ipatov, L. G. Gerchikov, and C. Guet, *Nanoscale Res. Lett.* **13**, 297 (2018).
34. Л.Г.Герчиков, А.Н.Ипатов, *ЖЭТФ* **159**, 1047 (2021).
35. R. Kostić, and D. Stojanović, *J. of Optoelectronics and Advanced Materials* **6**, 121 (2012).
36. А.В.Федоров, И.Д.Рухленко, А.В.Баранов, С.Ю.Кручинин, *Оптические свойства полупроводниковых квантовых точек*, Наука, Санкт-Петербург (2011).
37. А.И.Гусев, *Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии*, Физматлит, Москва (2009).
38. S. V. Gaponenko, *Optical properties of semiconductor nanocrystals*, Cambridge University Press, Cambridge (1998).
39. *Core/Shell Quantum Dots. Synthesis, Properties and Devices*, ed. by X. Tong and Z. M. Wand, *Lecture Notes in Nanoscale Science and Technology (book series)* **28**, Springer (2020).
40. V. I. Klimov et al., *Nature* **447**, 441 (2007).
41. D. Vasudevan, R. R. Gaddam, A. Trinchi, and I. Cole, *J. of Alloys and Compounds* **636**, 395 (2015).
42. Q. Q. Dou et al., *Scientific Reports* **5**, 8252 (2015).
43. R. A. Loukanov et al., *Colloids Surf. A.* **245**, 9 (2004).
44. *Nanomaterials for the Life*, Vol.6, *Semiconductor nanomaterials*, ed. by Ch. Kumar, Wiley-VCH Verlag GmbH, Weinheim (2010).
45. S. Kim, B. Fisher, H.-J. Eisler, and M. Bawendi, *J. Am. Chem. Soc.* **125**, 11467 (2003).
46. M. Tytus et al., *J. of Physics: Conference Series* **104**, 012011 (2008).
47. F. Iikawa et al., *Brazilian J. of Physics*, **34**, 555 (2004).
48. Y. Shoji, R. Tamaki, and Y. Okada, *AIP Advances* **7**, 065305 (2017).
49. *Clusters of Atoms and Molecules*, ed. by H. Haberland, Vol. I, II, *Springer Series in Chemical Physics*, Vol. **52, 56**, Berlin, Springer (1994).
50. W. A. de Heer, *Rev. Mod. Phys.* **65**, 611 (1993).
51. C. R. C. Wang, S. Pollack, D. Cameron, and M. M. Kappes, *J. Chem. Phys.* **93**, 3787 (1993).
52. C. Guet and W. R. Johnson, *Phys. Rev. B* **45**, 11283 (1992).
53. B. Palpant, B. Prével, J. Lermé et al., *Phys. Rev. B* **57**, 1963 (1998).
54. А.Н. Ипатов, В.К. Иванов, Р.Г. Полозков *ЖЭТФ* **144**, 727 (2013).
55. А.Н. Ипатов, Л.Г. Герчиков, *ЖЭТФ* **145**, 108 (2014).
56. Ipatov A. N., Ivanov V. K., and Polozkov R. G. *The European Phys. J. D* **68**, 249 (2014).
57. Ipatov A. N. and Gerchikov L. G., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **47**, 185101 (2014).
58. Л.Г. Герчиков, А.Н. Ипатов, *ЖЭТФ* **146**, 1014 (2014).
59. A. Ipatov, L. Gerchikov, and J. Christiano, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **92**, 7 (2017).
60. D. Bimberg, M. Grundmann, and N. N. Ledentsov, *Quantum Dot Heterostructures*, John Wiley and Sons (1999).
61. T. Shelawati, M. S. Nurisya, A. Mazliana et al., *Superlattices and Microstructures* **131**, 95 (2019).

62. G. Mie, *Ann. Phys.* **25**, 377 (1908).
63. G. F. Bertsch, R. A. Brorlia, *Oscillations in Finite Quantum Systems*, Cambridge University press, UK (1994).
64. *Электронно-дырочные капли в полупроводниках*, под ред. Л.В.Келдыша и К.Д.Джеффриса, Наука, Москва (1988).
65. Ll. Serra, F. Garcias, J. Navarro et al., *Phys. Rev. B* **46**, 9369 (1992).
66. D. A. Varshalovich, A. N. Moscalev, and V. K. Khersonskii, *Quantum Theory of Angular Momentum*, World Scientific, Singapore (1988).
67. M. Ya. Amusia and L. V. Chernysheva, *Computation of Atomic Processes*, IOP Publishing Ltd (1997).
68. R. Dreizler and E. Gross, *Density Functional Theory*, Plenum Press, New York (1995).
69. И.И.Собельман, *Введение в теорию атомных спектров*, Наука, Москва (1977).
70. T. Ihn, *Semiconductor Nanostructures: Quantum States and Electronic Transport*, Oxford University Press (2010).
71. F. Rossi, *Theory of Semiconductor Quantum Devices: Microscopic Modeling and Simulation Strategies*, Springer Science and Business Media, NY (2011)
72. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics*, Pergamon Press (1977).
73. C. de Boor, *A Practical Guide to Splines*, Springer Verlag, New York (1978).
74. J. Sapirstein and W. R. Johnson, *J. Phys. B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, **29**, 5213 (1996).
75. W. E. Ormand, J. M. Pacheco, S. Sanguinetti et al., *Z. Phys. D* **24** 401 (1992).
76. G. F. Bertsch and D. Tomanek, *Phys. Rev. B* **40**, 2749 (1989).
77. J. M. Pacheco and R. A. Broglia, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 400 (1989).
78. J. M. Pacheco and W. D. Schöne, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 4986 (1997).
79. F. Della Salla, R. Rousseau, A. Görling, and D. Marx, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 183401.1 (2004).
80. C. Yannouleas and R. A. Broglia, *Ann. Phys. (NY)* **217**, 105 (1991).

# ГЕНЕРАЦИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ В ПЫЛЕВОЙ ПЛАЗМЕ

*Б. М. Смирнов\**

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

Поступила в редакцию 10 января 2023 г.,  
после переработки 20 февраля 2022 г.  
Принята к публикации 20 февраля 2022 г.

Неоднородная пылевая плазма, микронные частицы или микрокапли которой находятся в плотном газе или в атмосферном воздухе, возбуждается импульсом, приводящим к слабой ионизации газа. Далее частицы заряжаются в результате прилипания к ним ионов газа. Стабильность пылевой плазмы определяется низкой подвижностью заряженных микрочастиц. Рассмотрены условия, при которых происходит разделение отрицательного и положительного зарядов в пылевой плазме, приводящее к созданию электрического поля. Представлены критерии генерации атмосферного электричества в плотном облаке в результате гравитационного падения заряженных микрокапель воды в атмосфере, слабая ионизация которой происходит под действием космических лучей. Показано, что это возможно только при неоднородном распределении микрокапель воды в облаке. Рассмотрены особенности пылевой плазмы, существующей в кольцах Сатурна, в потоке продуктов сгорания угля, а также в запыленной атмосфере угольной шахты.

**DOI:** 10.31857/S0044451023060135  
**EDN:** DHWCYY

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Заряженные микрочастицы и микрокапли в газе являются распространенным физическим объектом в природе и индустрии. В частности, кольца Сатурна состоят из ледяных частиц [1], срывааемых с поверхности спутников планеты. Они вращаются как целое в поле Сатурна и находятся под действием его магнитного поля. Однако малая толщина этого слоя пыли (примерно 10 м) по сравнению с радиусом всех слоев кольца Сатурна (около 300 км) свидетельствует о том, что эти микрочастицы не только заряжены, но и создают электрическое поле, которое вместе с магнитным полем планеты заставляет их находиться в предельно узком слое.

Другой пример [2] относится к взрывам в запыленных угольных шахтах, где микрочастицы пыли являются заряженными и создают электрические поля. Эти электрические поля создаются электрическими импульсами, которые чаще всего вызваны космическими частицами. Протекающие при

этом электрические процессы могут привести к детонации метана, сопровождающего угольную пыль. Для предотвращения этого используется вентиляция шахт [2], в результате которой из воздуха удаляются пылевые частицы.

Электрические поля и токи наблюдаются при извержении вулканов. Нередко в потоке извергающегося газа возникают молнии, что свидетельствует о действии электрических полей с участием заряженных частиц, которые присутствуют в продуктах извержения [3]. В этом случае развитие электрических процессов в продуктах извержения происходит таким же образом, как и в случае атмосферного электричества, когда оно заканчивается молниями.

Основное внимание будет уделено электрическим процессам в атмосфере Земли, главную роль в которых играют заряженные микрокапли воды. При анализе этих процессов существенна детальная информация о разных аспектах электрических процессов в атмосфере, полученная на основе измерений в атмосфере.

В дополнение к рассмотренным примерам добавим процессы сжигания жидких и твердых углеводородов в энергетических установках. Продукты сгорания могут содержать микрочастицы, особенно в режиме неполного сгорания топлива. Струя отхо-

\* E-mail: bmsmirnov@gmail.com

дящего газа с микрочастицами может быть возбуждена в результате прохождения ее через область газового разряда, что в конечном итоге приводит к зарядке микрочастиц. Эти процессы могут быть использованы как для освобождения струи, содержащей продукты сгорания, от твердых частиц, так и для диагностики продуктов сгорания.

## 2. КИНЕТИКА ЗАРЯДКИ МИКРОЧАСТИЦ ПЫЛЕВОЙ ПЛАЗМЫ

Для определенности рассмотрим импульсное возбуждение пылевой плазмы, основу которой составляет атмосферный воздух. Будем ориентироваться на микрокапли воды, которые находятся в кучевых облаках и обеспечивают генерацию атмосферного электричества. Кучевые облака включают в себя основную часть атмосферной конденсированной воды. Наряду с молекулами воздуха и насыщенного пара воды, состоящего из молекул воды, они содержат также микрокапли воды. Эти микрокапли кучевого облака присутствуют внутри отдельных сгустков или струй. При этом средний радиус  $r$  и плотность  $N_d$  микрокапель в области максимально плотности конденсированной воды при типичных условиях составляют [4–7]

$$r = 8 \text{ мкм}, N_d = 10^3 \text{ см}^{-3}. \quad (1)$$

Однако даже в этих областях массовая плотность конденсированной воды меньше массовой плотности водяного пара, состоящего из свободных молекул воды.

Будем считать, что возбуждение атмосферного воздуха, который составляет основу атмосферной пылевой плазмы, носит импульсный характер, причем длительность импульса меньше характерного времени зарядки пылевых микрочастиц. Возбуждение рассматриваемой системы сводится к ионизации атмосферного воздуха, и далее в результате прилипания к частицам происходит уменьшение плотности отрицательно  $N_-$  и положительно  $N_+$  заряженных атмосферных ионов. Сорт ионов в атмосфере зависит от атмосферных примесей. Для определенности будем ориентироваться на распространенный случай Бринкмана [8], когда при атмосферном давлении и температуре  $T = 262 \text{ К}$  подвижность отрицательных ионов в атмосфере равна  $1.9 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ , а для положительных ионов она составляет  $1.5 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ .

Ориентируясь на области атмосферы на высоте  $h = 4 \text{ км}$ , имеем, что в рамках модели стандартной атмосферы [9] плотность молекул воздуха на этой высоте равна  $1.9 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$  вместо  $2.7 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ , что соответствует нормальным условиям. Переходя к коэффициентам диффузии отрицательно  $D_-$  и положительно  $D_+$  заряженных ионов в атмосферном воздухе, на основании соотношения Эйнштейна на этой высоте получим

$$D_- = 0.061 \text{ см}^2/\text{с}, D_+ = 0.048 \text{ см}^2/\text{с}. \quad (2)$$

Константа скорости прилипания отрицательных  $k_{as}^-$  и положительных  $k_{as}^+$  ионов к нейтральной микрочастице согласно формуле Смолуховского [10] равны

$$k_{as}^- = 4\pi D_- r, k_{as}^+ = 4\pi D_+ r, \quad (3)$$

где  $r$  — радиус частицы. Взяв радиус частицы согласно формуле (1), получим следующие числовые значения констант скоростей прилипания ионов к микрочастице:

$$k_{as}^- = 6.1 \cdot 10^{-4} \text{ см}^3/\text{с}, k_{as}^+ = 4.8 \cdot 10^{-4} \text{ см}^3/\text{с}. \quad (4)$$

Для скоростей прилипания отрицательно  $\nu_{as}^-$  и положительно  $\nu_{as}^+$  заряженных ионов это дает

$$\begin{aligned} \nu_{as}^- &= N_d k_{as}^- = 0.61 \text{ с}^{-1}, \\ \nu_{as}^+ &= N_d k_{as}^+ = 0.48 \text{ с}^{-1}. \end{aligned} \quad (5)$$

Обозначая средний текущий заряд частицы как  $-Ze$ , где  $e$  — заряд электрона, а  $Z$  — целое число, имеем следующую систему уравнений баланса для плотности ионов и заряда частицы

$$\begin{aligned} \frac{dN_-}{dt} &= M(t) - k_{as}^- N_d N_- \exp\left(-\frac{Ze^2}{rT}\right), \\ \frac{dN_+}{dt} &= M(t) - k_{as}^+ N_d N_+, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} N_d \frac{dZ}{dt} &= \frac{dN_-}{dt} - \frac{dN_+}{dt} = \\ &= k_{as}^+ N_d N_+ - k_{as}^- N_d N_- \exp\left(-\frac{Ze^2}{rT}\right). \end{aligned}$$

Здесь  $M(t)$  — скорость ионизации воздуха космическими лучами, которая заканчивается раньше, чем заметно упадет плотность ионов в результате прилипания ионов к частицам. Множитель  $\exp(-Ze^2/rT)$  учитывает электрический потенциал заряженной частицы относительно однозарядных молекулярных

ионов. При высокой плотности ионов в процессе релаксации устанавливается квазистационарный режим, который выражается в равенстве потоков положительных и отрицательных ионов на поверхность частицы. Их равенство дает уравнение баланса для плотности заряда в воздухе, а также уравнение для самого заряда частицы  $Z$  в квазинейтральной атмосферной плазме:

$$N_+ = N_- + ZN_d, \quad (7)$$

$$Z = \frac{rT}{e^2} \ln \left[ \frac{D_-}{D_+(1 + ZN_d/N_-)} \right].$$

Рассматриваемый режим относится к высокой плотности ионов в атмосферном воздухе в соответствии с критерием

$$N_+ \gg ZN_d. \quad (8)$$

В этом пределе имеем [11]

$$Z = \frac{rT}{e^2} \ln \left( \frac{D_- N_-}{D_+ N_+} \right). \quad (9)$$

В частности, в случае Бринкмана, когда коэффициенты диффузии для положительных и отрицательных ионов даются формулой (2), а плотности отрицательных и положительных ионов равны ( $N_- = N_+$ ), заряд микрочастицы составляет  $Z = 40$ . Отметим, что наблюдаемое время жизни кучевого облака, которое составляет часы, соответствует заряду микрокапли  $Z = 20-30$  [12]. Заряд микрокапель задерживает их конденсацию в кучевом облаке в силу кулоновского отталкивания, причем в случае нейтральных микрокапель процесс конденсации вплоть до капель дождя составляет порядка десятков минут.

На рис. 1 приведена зависимость заряда микрочастицы  $Z$  от плотности молекулярных ионов согласно формуле (7) при выполнении критерия (8) и для значений коэффициентов диффузии ионов согласно формуле (2). Соответствующий этому малый параметр  $ZN_d/N_+$  равен 0.12 для плотности положительных ионов  $N_- = 1 \cdot 10^5 \text{ см}^{-3}$ , составляет 0.007 для плотности положительных ионов  $N_+ = 3 \cdot 10^5 \text{ см}^{-3}$ , а также этот параметр равен 0.003 при  $N_+ = 1 \cdot 10^6 \text{ см}^{-3}$ .

Отметим, что при малой плотности молекулярных ионов в квазинейтральной атмосферной плазме, которая определяется первым уравнением (7), заряд микрокапли мал. В частности, уравнения (7) при средней скорости ионизации атмосферы космическими лучами, равной  $M = 20 \text{ см}^{-3} \text{ с}^{-1}$ , дают для

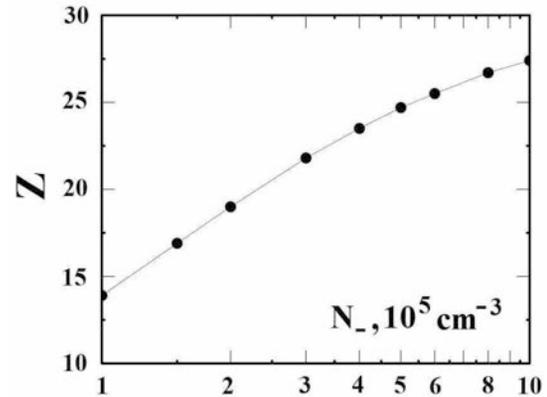


Рис. 1. Заряд  $Z$  растущих микрокапель в кучевом облаке в зависимости от плотности  $N_+$  положительных ионов в соответствии с уравнением (7)

параметров квазинейтральной атмосферной плазмы значения  $N_- = 33 \text{ см}^{-3}$ ,  $N_+ = 42 \text{ см}^{-3}$ ,  $Z = 0.01$ .

### 3. ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ В КУЧЕВЫХ ОБЛАКАХ

Для реализации представленного выше режима зарядки микрокапель необходим достаточно эффективный источник ионизации атмосферного воздуха. Рассмотрим сначала характер ионизации атмосферного воздуха под действием космических лучей при создании атмосферного электричества. Космические лучи содержат в основном быстрые протоны и нейтроны, причем они не могут проникнуть в атмосферу Земли из-за магнитного поля Земли, если их энергия не превышает определенный предел (магнитную жесткость), которая составляет порядка 10 ГэВ вдали от полюсов. В результате ядерной реакции космических лучей с ядрами молекул воздуха создается ливень элементарных частиц (электронов, нуклонов, фотонов, мезонов), которые далее вызывают ионизацию молекул воздуха. В результате на один быстрый протон или нейтрон приходится порядка  $10^9$  образующихся пар отрицательных и положительных ионов.

Продукты ядерной реакции имеют разную длину пробега в атмосферном воздухе. В частности, сечение поглощения молекул воздуха в области вакуумного ультрафиолета, соответствующее ионизации молекул воздуха, составляет  $1 \cdot 10^{-18} \text{ см}^2$  [13], что соответствует длине пробега этих фотонов в воздухе 0.05 см. Сосредоточившись на атмосферном элек-

тричестве и учитывая характеризующие их параметры, которые следуют из наблюдений и измерений, определим, при каких условиях возможно возникновение электрического поля в атмосфере.

Будем считать, что область ионизации характеризуется параметрами микрокапель в соответствии с формулой (1). Характерное время установления равновесного заряда, согласно данным рис. 1, составляет

$$\tau \approx \frac{Z}{\nu_{as}} \approx 30 \text{ с},$$

что отвечает размеру  $R$  отдельной ячейки, в которой происходит ионизация от одной космической частицы, и, соответственно, размеру области неоднородности,

$$R \approx \sqrt{\frac{6D_i}{\nu_{as}}} \approx 3 \text{ см},$$

причем указанные параметры относятся как к положительным, так и к отрицательным ионам. При этом время нахождения заряженной микрокапли внутри ячейки  $t_g = R/v_g \approx 4 \text{ с}$ , где  $v_g = 0.8 \text{ см/с}$  — скорость падения микрокапли, относительно мало.

Полученный размер  $R$  ячейки ионизации является предельным для возможного числа пар ионов, образованных под действием космических частиц. Учитывая, что на стадии зарядки микрокапель воды плотность заряда микрокапель в рассматриваемом центре ионизации составляет  $eZN_d \approx 2 \cdot 10^4 e \text{ см}^{-3}$ , что соответствует полному заряду микрокапель в типичном центре ионизации под действием космических лучей, равному  $eZN_dV \approx 2 \cdot 10^6 e$ , где  $V \approx 100 \text{ см}^3$  — объем элементарной ячейки ионизации.

Рассматриваемые неоднородности в атмосферном воздухе кучевого облака определяются характером конвективного движения воздуха [14], которое можно представить как сумму отдельных вихрей. На это накладывається движение воздуха в виде восходящих потоков, которые сопровождается конвективное перемещение воздуха. Отметим важную роль восходящих потоков в образовании микрокапель воды в кучевом облаке. Действительно, в рамках модели стандартной атмосферы Standard, которая оперирует с усредненными по времени и земному шару параметрами атмосферы, влажность воздуха на любой высоте ниже 100%, т. е. конденсация воды невозможна. Наблюдаемое образование микрокапель воды в кучевом облаке происходит в результате перемешивания слоев влажного приземного воздуха и

холодного воздуха вдали от ее поверхности под действием восходящих потоков.

Подойдем к проблеме формирования атмосферного электричества с других позиций. Выясним характер последующих процессов разделения заряда в образуемой под действием космических лучей атмосферной плазме, которая в предгрозовом кучевом облаке сопровождается образованием электрического поля в атмосфере напряженностью  $E = 200 \text{ В/см}$  [15]. Такая напряженность электрического поля соответствует плотности  $\sigma$  электрического заряда на границе кучевого облака

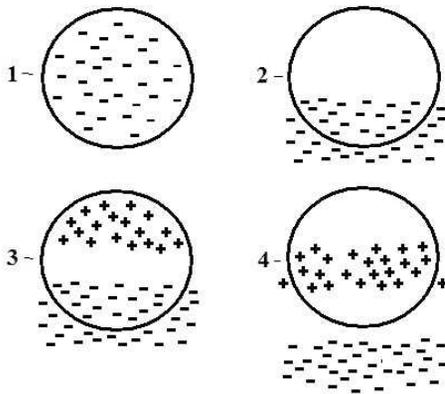
$$\sigma = \frac{E}{4\pi} \approx 3 \cdot 10^7 e \text{ см}^{-2}.$$

Сравнивая эту величину с суммарным зарядом микрокапель типичного центра ионизации  $eZN_dV \approx 1 \cdot 10^8 e$ , для плотности ячеек ионизации, каждая из которых создается отдельной космической частицей, находим величину  $0.3 \text{ см}^{-2}$ .

Отметим, что падение отрицательно заряженных микрокапель и их выход из элементарной ячейки ионизации оставляют избыточный положительный заряд в ячейке ионизации в виде положительных молекулярных ионов. Эти ионы в конечном итоге прилипают к микрокаплям воды. Размер положительно заряженных капель меньше, чем отрицательно заряженных. Соответственно, они движутся вниз с меньшей скоростью, чем падают вниз отрицательно заряженные микрокапли. Именно в этом случае может произойти разделение заряда в кучевом облаке за время жизни кучевого облака, которое измеряется часами. В результате за время жизни кучевого облака создаются электрические поля, которые далее могут стать причиной молний.

Отсюда следует, что для реализации наблюдаемых явлений необходимо неоднородное распределение микрокапель внутри кучевого облака. В противном случае на смену большим микрокаплям, ушедшим из ячейки ионизации под действием гравитационного поля Земли, придут новые микрокапли того же размера. На рис. 2 представлена последовательность процессов в отдельной ячейке ионизации при формировании атмосферного электричества.

Для оценки роли нескомпенсированного заряда в отдельной ячейке после ухода из нее отрицательно заряженных микрокапель, определим создаваемое им электрическое поле. Для максимального размера ячейки  $R \approx 3 \text{ см}$ , которому соответствует объем  $V \approx 100 \text{ см}^3$ , при плотности нескомпенсированного заряда  $ZN_d \approx 2 \cdot 10^4 e \text{ см}^{-3}$  для величины нескомпен-



**Рис. 2.** Схема процессов формирования электрического поля под действием космических лучей в пределах отдельной ячейки: 1 — зарядка микрокапель воды; 2 — падение отрицательно заряженных микрокапель воды и формирование избыточного положительного заряда в верхней части ионизационной ячейки; 3 — прилипание положительных молекулярных ионов к микрокаплям воды; 4 — расстояние между положительно и отрицательно заряженными микрокаплями увеличивается со временем, что возможно при разном размере отрицательно и положительно заряженных микрокапель

сированного заряда имеем  $q = VN_- \approx 2 \cdot 10^6 e$ . Это соответствует напряженности электрического поля на границе ячейки за счет нескомпенсированного заряда

$$E = \frac{q}{4\pi R^2} \approx 0.003 \frac{\text{В}}{\text{см}}.$$

Как видно, возникающие в пределах отдельной ячейки электрические поля относительно малы и не влияют на рассматриваемые процессы.

#### 4. ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ В ЗАПЫЛЕННОМ ГАЗЕ

Электрические процессы в ионизованных газах, содержащих твердые заряженные микрочастицы, аналогичны рассмотренным выше электрическим процессам в кучевом облаке. Действительно, электрический заряд микрокапель предотвращает их слипание, и поэтому поведение системы жидких и твердых частиц в газе одинаково. При этом жидкие микрокапли в атмосфере образуются в результате конденсации, одним из каналов которой является объединение двух капель при их контакте, как это имеет место в кучевом облаке. Равновесный заряд микрокапель устанавливается в процессе их роста, а последующее прилипание к ним отрицательных и

положительных молекулярных ионов регулирует зарядовое равновесие посредством уравнений баланса (6).

Рассмотрим поведение разных систем, содержащих твердые заряженные частицы, с позиций формирования атмосферного электричества. Электрические поля достаточной напряженности для протекания электрического тока не формируются в случае взрыва метана в шахте с запыленным воздухом в силу малых размеров шахты. Эти взрывы определяются химическими процессами в запыленном воздухе, а также электрическими процессами в окружающих породах.

Однако продукты извержения вулканов могут участвовать в таких же электрических процессах, как и в кучевых облаках. Разные знаки заряда частиц разного размера следует из неоднородного распределения этих частиц в пространстве. Кроме того, в случае извержения вулканов возможен дополнительный и более интенсивный механизм ионизации воздуха, происходящий в жерлах вулканов в результате высокотемпературных процессов.

При этом мы не можем проанализировать электрические процессы в пылевой или запыленной плазме столь же подробно, как и в случае электрических процессов в атмосфере. По этой причине описание структуры кольца Сатурна также является схематичным. Действительно, согласно проведенным исследованием [1] кольцо Сатурна представляет собой тонкий слой ледяных частиц, источником которых являются спутники Сатурна. Поскольку эти частицы обдуваются солнечным ветром, состоящим из электронов и протонов, эти частицы заряжены отрицательно. Поскольку они вращаются вокруг планеты, при линейной скорости вращения  $v_r$  на каждую частицу действует сила Лоренца

$$\mathbf{F} = \frac{Ze}{c} [\mathbf{v}_r \times \mathbf{H}],$$

где  $Z$  — заряд частицы,  $c$  — скорость света,  $\mathbf{H}$  — напряженность магнитного поля Сатурна.

При этом заряд частицы формируется солнечным ветром, который заряжает ледяные частицы отрицательно. Кроме того, часть солнечного ветра отражается от кольца, и у границы кольца формируется плазма, содержащая избыток протонов. Эта плазма компенсирует отрицательный заряд кольца, а создаваемое ею электрическое поле компенсирует электрическое поле кольца. При такой структуре стабильность кольца нарушается за большие времена. А это означает, что заряженные ледяные части-

цы со временем уходят из кольца, а на их смену приходят новые частицы, испаренные со спутников Сатурна. В такой ситуации электрические токи внутри кольца в связи с перемещением заряженных частиц устанавливаются распределение частиц внутри кольца.

Видимо, стабильность пылевой плазмы, образующей кольцо Сатурна, определяет разделение отрицательно и положительного заряженных ледяных частиц, которые находятся на разных сторонах кольца. Результирующее электрическое поле внутри кольца втягивает заряженные частицы внутрь кольца и тем самым обеспечивает его стабильность. Продольные электрические поля связаны с зарядами ледяных частиц и ответственны за перемещение частиц в радиальном направлении. При этом как зарядовое равновесие частиц, так и их радиальное распределение носят динамический характер.

Из-за отсутствия информации относительно электрических процессов вокруг кольца Сатурна невозможно проанализировать их детально. Тем не менее можно оценить характерное содержание льда в кольце Сатурна, считая, что толщина кольца Сатурна сравнима с длиной пробега потока электронов и протонов солнечного ветра при прохождении через кольцо. В частности, исходя из этого можно оценить плотность замороженной воды в кольце Сатурна. Если считать характерный размер ледяных частиц в кольце как  $r \approx 100$  мкм, можно оценить массовую плотность замороженной воды на единицу поверхности кольца как  $10 \text{ г/м}^2$ . Далее, принимая толщину кольца Сатурна приблизительно равной  $l \approx 10$  м [1], получим, что массовая плотность воды в кольце Сатурна составляет порядка  $1 \text{ г/м}^3$ .

## 5. ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ В ГРОВОУХ ЯВЛЕНИЯХ

Информация, которая следует из анализа атмосферного электричества и грозных явлений, позволяет составить физическую картину электрических процессов в атмосфере. Поэтому далее мы представим параметры электрических явлений в атмосфере, чтобы описать разные аспекты атмосферного электричества, включая электрические процессы в атмосфере. Земля заряжена отрицательно, и атмосферу над ней удобно разделить на две части, так что в основной ее части, т. е. в атмосфере ясного неба, заряженные микрокапли воды отсутствуют. Эта часть атмосферы ответственна за раз-

рядку Земли как электрического объекта и занимает основную площадь поверхности Земли, а полный электрический ток разрядки Земли составляет  $I = 1700 \text{ А}$  [16, 17]. Очевидно, что ток зарядки, генерируемый в кучевых облаках, равен этой величине.

Ориентируясь на параметры микрокапель в соответствии с формулой (1), принимая средний заряд микрокапли как  $Z = 20$  и считая, что проекции отдельных ячеек ионизации покрывают всю поверхность Земли под кучевым облаком, для плотности тока зарядки Земли в кучевом облаке получим

$$i_d = ZeN_d v_g = 3 \cdot 10^{-15} \text{ А/см}^2. \quad (10)$$

Сравнивая ее с плотностью тока разрядки, получим, что для реализации наблюдательных данных необходимо, чтобы кучевые облака покрывали примерно 10% площади поверхности Земли.

Отрицательно заряженные микрокапли движутся к Земле против электрического поля Земли, которое у поверхности составляет примерно  $E_0 = 120 \text{ В/см}$ . Сила электрического поля Земли, действующая на отдельную микрокаплю и направленная вверх, составляет  $ZeE_0 \approx 2 \cdot 10^3 \text{ эВ/см}$ . Сравним ее с весом микрокапли, которая составляет  $m_d g \sim 10^6 \text{ эВ/см}$ , где  $m_d = 2.2 \cdot 10^{-9} \text{ г}$  — масса отдельной микрокапли,  $g = 980 \text{ см/с}^2$  — ускорение свободного падения. Отношение этих сил составляет 0.002, так что электрическое поле Земли не влияет на движение микрокапли в гравитационном поле Земли.

Мы рассматриваем электрические явления в атмосфере как вторичный процесс циркуляции воды через атмосферу. Отношение электрического тока зарядки  $I = 1700 \text{ А}$  к массовому потоку воды  $J$  в результате ее циркуляции через атмосферу составляет [18]

$$\frac{I}{J} \approx 10^{-10} \frac{\text{Кл}}{\text{г}}. \quad (11)$$

Считая, что ток зарядки создается падением заряженных микрокапель воды, имеем для рассматриваемого отношения

$$\frac{Ze}{m_d} \approx 2 \cdot 10^{-9} \frac{\text{Кл}}{\text{г}}. \quad (12)$$

Как видно, эффективность рассматриваемого механизма зарядки Земли составляет порядка 10%.

Продолжение процесса падения микрокапель воды в кучевом облаке может происходить по двум сценариям. В холодную погоду заряженные микрокапли достигают поверхности Земли и передают ей

свой заряд. Другой, более известный, сценарий заканчивается молниями. В этом случае, реализуемом в теплое время года, заряженные микрокапли воды теряют свой заряд в результате испарения молекулярных ионов с поверхности микрокапли. Это испарение эффективно происходит при определенной температуре, что соответствует определенной высоте атмосферы. На этой высоте скапливается отрицательный заряд, связанный с молекулярными ионами. Этот заряд обеспечивает электрический потенциал между нижней частью кучевого облака и поверхностью Земли, под действием которого могут образоваться молнии.

Спутниковые измерения показывают, что в среднем суммарно по всему земному шару происходит 50–60 вспышек молний в секунду [19–21], поскольку эти вспышки могут быть зафиксированы на большом расстоянии от молнии. Поскольку каждая вспышка молнии соответствует переносу электричества примерно 4–5 Кл [22], по этому каналу реализуется электрический ток на поверхность Земли, равный примерно 200–300 А, что составляет малую часть от полного тока зарядки  $I = 1700$  А. Поэтому зарядка Земли определяется главным образом падением заряженных микрокапель воды на поверхность Земли.

## 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Пылевая плазма представляет собой специфический физический объект, представляющий собой заряженные микрочастицы, которые находятся в газе. В отличие от обычной плазмы заряд микрочастицы может включать в себя много элементарных зарядов, а стабильность пылевой плазмы определяется низкой подвижностью заряженных микрочастиц.

Наиболее исследованной среди рассматриваемых типов плазмы, содержащей микрочастицы, является атмосферная плазма, создаваемая под действием космических лучей. Отметим специальные условия, при которых происходит генерация атмосферного электричества. Наблюдаемые параметры атмосферного электричества требуют сочетания определенных факторов. Именно, импульсный характер ионизации позволяет создать относительно высокую плотность ионов в ограниченной области пространства в течение короткого промежутка времени после ионизации воздуха космической частицей, а неоднородная структура облака позволяет крупным отрицательно заряженным микрокаплям быстро выйти

из зоны ионизации. Поэтому положительный заряд получают микрокапли меньших размеров, а в результате разной скорости гравитационного падения для больших и малых микрокапель создается высокий электрический потенциал грозового облака в течение его времени жизни, что может привести к возникновению молний.

Если пылевая плазма движется в магнитном поле, как это имеет место в кольце Сатурна, создается электрическое поле, так что совокупность процессов с участием пыли, солнечного ветра и электрического поля может привести к специфической структуре пылевой плазмы.

Пропускание электрического тока через струю атмосферного воздуха, содержащего продукты сжигания органического топлива, позволяет извлекать из нее заряженные пылевые частицы, а также может быть использовано для диагностики. В различных типах пылевой плазмы, как существующих в природе, так и образуемых в результате хозяйственной деятельности человека, протекают процессы, близкие по своему характеру. Исследование этих процессов в пылевой плазме способствует более глубокому пониманию пылевой плазмы и более широкому ее использованию.

## ЛИТЕРАТУРА

1. <https://solarsystem.nasa.gov/planets/saturn/in-depth/>
2. P. Thakur, *Advanced Mine Ventilation Respirable Coal Dust, Combustible Gas and Mine Fire Control*, Amsterdam, Elsevier (2019).
3. <https://www.theatlantic.com/photo/2011/06/chilean-puyehue-volcano-erupts/100081/>
4. B. J. Mason, *The Physics of Clouds*, Clarendon Press, Oxford (1971).
5. J. Warner, *Tellus* **7**, 450 (1955).
6. W. R. Leitch and G. A. Isaak, *Atmosph. Environ.* **25**, 601(1991)
7. <http://en.wikipedia.org/wiki/Liquid-water-content>

8. J. Bricard, in: *Problems of Atmospheric and Space Electricity*, ed. by C. C. Coronity, Amsterdam, Elsevier (1965), p. 82.
9. *U.S. Standard Atmosphere*, U. S. Government Printing Office, Washington (1976).
10. M. V. Smolukhowski, *Zs. Phys.* **17**, 585 (1916).
11. Б. М. Смирнов, УФН **170**, 495 (2000) [B. M. Smirnov, *Phys. Usp.* **43**, 453 (2000)].
12. Б. М. Смирнов, УФН **184**, 1177 (2014) [B. M. Smirnov, *Phys. Usp.* **57**, 1041 (2014)].
13. N. Liu and V. P. Pasko, *J. Geophys. Res.* **109**, A04301 (2004).
14. V. P. Krainov, *Qualitative Methods in Physical Kinetics and Hydrodynamics*, American Inst. of Physics, New York (1992).
15. J. R. Dwyer and M. Uman, *Phys. Rep.* **534**, 147 (2014).
16. H. Israël, *Atmospheric Electricity*, Keter Press Binding, Jerusalem (1973).
17. R. P. Feynman, R. B. Leighton, and M. Sands, *The Feynman Lectures of Physics*, Addison-Wesley, Reading (1964), Vol. 2.
18. B. M. Smirnov, *Global Atmospheric Phenomena Involving Water*, Springer Atmospheric Series, Switzerland (2022).
19. D. A. Gurnett, P. Zarka, R. Manning et al., *Nature* **409**, 313(2001)
20. H. J. Christian, R. J. Blakeslee, D. J. Boccippio et al., *J. Geophys. Res.* **108**, 4005 (2003).
21. <http://en.wikipedia.org/wiki/Distribution-of-lightning>
22. M. A. Uman, *Lightning*, McGraw Hill, New York (1969).

# КОРРЕЛЯЦИИ ЗАВИХРЕННОСТИ ВНУТРИ КОГЕРЕНТНОГО ВИХРЯ

*И. В. Колоколов<sup>a,b\*</sup>, В. В. Лебедев<sup>a,b</sup>, М. М. Тумакова<sup>c</sup>*

<sup>a</sup> *Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук  
142432, Черногловка, Московская обл., Россия*

<sup>b</sup> *Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»  
101000, Москва, Россия*

<sup>c</sup> *Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»  
190008, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 9 февраля 2023 г.,  
после переработки 9 февраля 2023 г.  
Принята к публикации 16 февраля 2023 г.

Исследуются флуктуации завихренности внутри когерентного вихря, порожденного обратным каскадом энергии в двумерной турбулентности. Временные и пространственные корреляции могут быть охарактеризованы парной корреляционной функцией. Взаимодействие между флуктуациями приводит к ненулевому значению третьего момента завихренности. Исследованы парная корреляционная функция и третий момент завихренности для модели, в которой накачка имеет малое время корреляции. Найдены явные выражения для гауссовой пространственной корреляционной функции силы накачки. Они подтверждают общие предсказания, полученные ранее.

DOI: 10.31857/S0044451023060147  
EDN: DHWGKX

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Двумерная турбулентность является предметом многочисленных исследований [1]. Это состояние можно наблюдать в тонких слоях жидкости на масштабах, превышающих толщину слоя. С практической точки зрения, наиболее интересным таким «слоем» является атмосфера. Конечно, атмосфера — очень сложный объект, и ее подробное описание — чрезвычайно сложная задача. Однако некоторые общие особенности двумерной турбулентности могли бы быть полезны для понимания атмосферных явлений. Обратим внимание в этой связи на тенденцию образования крупномасштабных вихрей из мелкомасштабных благодаря нелинейному гидродинамическому взаимодействию в двумерных жидкостях [2–4]. При наличии внешнего воздействия (накачки) эта тенденция приводит к формированию обратного

каскада энергии на масштабах, превышающих длину накачки [5].

В конечной ячейке передача энергии на большие масштабы приводит к образованию больших вихрей диаметром порядка размера ячейки. Такие вихри наблюдались как в лабораторных экспериментах [6, 7], так и в численном моделировании [8, 9]. При некоторых условиях большой вихрь имеет бесконечное время жизни, т. е. он обладает длительными временными корреляциями. Мы называем такие большие вихри когерентными. В работе [10] при численном моделировании наблюдался плоский профиль средней скорости когерентного вихря и представлены некоторые аргументы, объясняющие этот профиль. В работах [11–15] был обоснован квазилинейный режим флуктуаций течения внутри когерентного вихря, получен плоский профиль скорости и обоснованы некоторые корреляционные функции скоростей. В работе [16] установлен критерий формирования когерентного вихря, который был подтвержден при прямом численном моделировании [17].

Мы рассматриваем случай, когда двумерная турбулентность возбуждается постоянной мелкомасштабной накачкой (внешней силой). Если сила ста-

\* E-mail: igor.kokolov@gmail.com

тична или обладает статистическими свойствами, однородными во времени, то, в конечном итоге, достигается статистически однородное во времени турбулентное состояние. Именно в этой ситуации могут появиться когерентные вихри. Лабораторные эксперименты и численное моделирование показывают, что когерентный вихрь в среднем изотропен. Изотропия объясняется быстрым вращением, подавляющим анизотропные возмущения на фоне изотропного вращения. Подчеркнем, что среднее течение когерентного вихря представляет собой нетвердотельное дифференциальное вращение. Такое движение существенно деформирует мелкомасштабные флуктуации, подавляя их нелинейное взаимодействие. Это свойство объясняет применимость квазилинейного приближения для флуктуаций течения внутри когерентного вихря. Деформация делает корреляционные функции флуктуаций потока сильноанизотропными. Структура корреляционных функций имеет решающее значение для таких процессов, как перенос пассивного скаляра (температурного поля или концентрации загрязняющих веществ) внутри когерентного вихря.

Нас интересуют корреляционные функции флуктуирующей завихренности. В квазилинейном приближении корреляционные функции сводятся к парной корреляционной функции. Чтобы найти корреляционную функцию, необходимо изучить эволюцию мелкомасштабных флуктуаций потока, создаваемых накачкой, внутри когерентного вихря. Некоторые универсальные скейлинговые свойства корреляционной функции были сформулированы нами ранее [18]. Однако важно проверить результаты путем явных вычислений с использованием какой-либо конкретной модели. Мы выбрали модель, в которой предполагается, что накачка представляет собой случайный процесс с малой длиной корреляции. Предполагается, что пространственная парная корреляционная функция внешней силы является гауссовой функцией расстояния между точками. Аналитические вычисления в этой модели позволили нам найти явные аналитические выражения для корреляционной функции завихренности, подтверждающие предсказания работы [18].

Хотя нелинейное взаимодействие флуктуаций течения внутри когерентного вихря является слабым, оно играет существенную роль в некоторых процессах. В качестве примера отметим перенос энергии внутри когерентного вихря. Кроме того, сила взаимодействия растет по мере удаления от центра вихря. Таким образом, оценка силы необходима

для установления границы вихря и характера флуктуаций вблизи границы. Сила взаимодействия может быть охарактеризована третьим моментом завихренности, который равен нулю в квазилинейном приближении. В настоящей работе мы вычислили третий момент в рамках приведенной выше модели в первом порядке теории возмущений по взаимодействию флуктуаций и нашли для него явное аналитическое выражение.

Работа построена следующим образом. В разд. 2 мы приводим некоторые общие соотношения, касающиеся флуктуаций внутри когерентного вихря. В разд. 3 мы развиваем теорию возмущений, необходимую для вычисления корреляционных функций завихренности. В разд. 4 мы исследуем парную корреляционную функцию завихренности. В разд. 5 мы вычисляем третий момент завихренности. В разд. 6 мы подводим итоги нашего исследования.

## 2. ОБЩИЕ СООТНОШЕНИЯ

Мы рассматриваем двумерную турбулентность, возбуждаемую внешней случайной силой со стационарной статистикой. Мы анализируем статистически стационарное состояние, реализуемое после некоторого переходного процесса. В этом состоянии характеристики когерентных вихрей не зависят от времени. Приведем два условия, необходимых для появления когерентных вихрей в системе. Первым условием является

$$\epsilon \gg L^2 \alpha^3, \quad (1)$$

где  $\epsilon$  — темп выработки энергии на единицу массы (обеспечиваемый внешним воздействием),  $L$  — размер ячейки, а  $\alpha$  — коэффициент трения о дно. Условие (1) означает, что энергия, переносимая обратным каскадом, накапливается на масштабе  $L$ . Вторым условием является

$$\alpha \lesssim \nu k_f^2, \quad (2)$$

где  $\nu$  — коэффициент кинематической вязкости, а  $k_f$  является характерным волновым вектором внешней силы. Условие (2) было выведено в работе [16] и подтверждено прямым численным моделированием, см. [17].

Удобно исследовать когерентный вихрь в системе отсчета, связанной с центром вихря. В этой системе отсчета среднее (когерентное) течение представляет собой дифференциальное вращение, которое может быть описано полярной (тангенциальной)

скоростью  $U$ , зависящей от расстояния  $r$  от точки наблюдения до центра вихря. Локально дифференциальное вращение представляет собой сдвиговое течение с темпом сдвига

$$\Sigma = r\partial_r(U/r), \quad (3)$$

также зависящим от  $r$ . Обратим внимание, что для твердотельного вращения, где  $U \propto r$ , темп сдвига (3) равен нулю. Для плоского профиля скорости, полученного в работах [11, 12, 15],  $U$  не зависит от  $r$ . Тогда темп сдвига ведет себя как  $\Sigma \propto r^{-1}$ , т.е.  $\Sigma$  уменьшается по мере роста  $r$ . Таким образом, подавление взаимодействия флуктуаций потока, связанных с когерентным вихрем, ослабевает по мере увеличения  $r$ .

Основным объектом нашего исследования являются корреляционные функции завихренности  $\varpi$ , которые флуктуируют на фоне средней завихренности  $\Omega$  в когерентном вихре. Мы предполагаем, что эти флуктуации вызваны накачкой, которая имеет относительно небольшую длину корреляции  $k_f^{-1}$ . При изучении флуктуаций вблизи окружности радиусом  $R$ , намного превышающим длину корреляции накачки,  $k_f R \gg 1$ , мы можем ограничиться рассмотрением узкой окрестности этой окружности. Затем, перейдя в систему отсчета, вращающуюся с угловой скоростью  $\Omega(R)$ , мы получаем следующее линейное уравнение для  $\varpi$ :

$$(\partial_t + \hat{\mathcal{L}})\varpi = \phi, \quad \hat{\mathcal{L}} = \Sigma x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} + \alpha - \nu \nabla^2, \quad (4)$$

где  $\Sigma$  — темп сдвига (3), взятый при  $r = R$ . Тангенциальная переменная  $x_1 = R\varphi$  ( $\varphi$  — полярный угол) и радиальная переменная  $x_2 = r - R$  являются локальными декартовыми координатами в выбранной системе отсчета. В уравнении (4)  $\phi$  — ротор внешней силы  $\mathbf{f}$  на единицу массы,  $\phi = \text{curl} \mathbf{f}$ .

Критерием, оправдывающим квазилинейную аппроксимацию, является

$$\Sigma \gg (\epsilon k_f^2)^{1/3}, \quad (5)$$

где правая часть соотношения представляет собой нелинейный темп Колмогорова на масштабе накачки. В свою очередь, этот темп должен быть намного больше, чем вязкое затухание на этом же масштабе:

$$(\epsilon k_f^2)^{1/3} \gg \nu k_f^2. \quad (6)$$

Критерий (6) — это не что иное, как условие большого числа Рейнольдса на масштабе накачки. Это

условие необходимо для возбуждения турбулентности. Объединяя неравенства (5), (6), находим неравенство

$$\Sigma \gg \nu k_f^2, \quad (7)$$

выполняющееся внутри когерентного вихря.

Уравнение (4) демонстрирует, что задача сводится к гидродинамическому движению на фоне стационарного сдвигового потока. Наличие сдвигового потока нарушает пространственную однородность. Точнее, однородность нарушается вдоль второй оси. Этот факт усложняет исследование решений уравнения (4). Уравнение (4) без накачки  $\phi$  было проанализировано в работе [19]. Нас интересуют корреляционные функции  $\varpi$ . Чтобы найти эти корреляционные функции, следует решить уравнение (4) для произвольного  $\phi$ , а затем усреднить соответствующее произведение по статистике  $\phi$ .

В настоящей работе мы используем модель накачки с малой длиной корреляции. Статистические свойства накачки определяются парной корреляционной функцией

$$\langle \phi(t_1, \mathbf{x}) \phi(t_2, \mathbf{y}) \rangle = -2\epsilon \delta(t_1 - t_2) \nabla^2 \Xi(\mathbf{x} - \mathbf{y}). \quad (8)$$

Угловые скобки в уравнении (8) и ниже обозначают средние значения, полученные путем усреднения по времени в эксперименте. В теории угловые скобки означают усреднение по статистике системы. Лапласиан  $\nabla^2$  в уравнении (8) объясняется соотношением  $\varpi = \text{curl} \mathbf{v}$ , где  $\mathbf{v}$  — скорость флуктуирующего течения.

Далее мы используем специальную форму парной корреляционной функции накачки:

$$\Xi(\mathbf{x}) = \exp(-k_f^2 |\mathbf{x}|^2 / 2). \quad (9)$$

Тогда  $\epsilon$  в уравнении (8) — это мощность накачки (температура производства энергии на единицу массы). Корреляционная функция накачки (9) позволяет нам явно найти парную корреляционную функцию  $\langle \varpi \varpi \rangle$  и третий момент  $\langle \varpi^3 \rangle$ . Однако их качественные свойства универсальны и не зависят от конкретной формы парной корреляционной функции накачки.

В работе [18] введено время  $\tau_*$ , определяющее характерное время, за которое формируется второй момент  $\varpi$ . Время определяется как

$$\tau_* = (\Sigma^2 \nu k_f^2)^{-1/3}, \quad \Sigma \gg \tau_*^{-1} \gg \nu k_f^2. \quad (10)$$

Неравенства в уравнении (10) объясняются условием (7). Обратим также внимание на то, что  $\alpha \tau_* \ll 1$ . Неравенство объясняется тем же условием (7) и

условием (2), необходимым для реализации когерентного вихря.

Если интересоваться эффектами, связанными с взаимодействием флуктуаций, то следует ввести нелинейный член в линейное уравнение (4). Он определяется нелинейным членом в уравнении Навье–Стокса, ответственным за взаимодействие флуктуаций. Добавляя нелинейный член к линейному уравнению (4), находим

$$\partial_t \varpi + \hat{\mathcal{L}}\varpi + \nabla(\mathbf{v}\varpi - \langle \mathbf{v}\varpi \rangle) = \phi. \quad (11)$$

Введение среднего значения  $\langle \mathbf{v}\varpi \rangle$  в уравнение (11) связано с тем фактом, что мы полагаем, что  $\langle \varpi \rangle = 0$ ,  $\langle \phi \rangle = 0$ . Первое условие связано с определением флуктуирующего потока. Второе условие означает, что внешнее воздействие в среднем не приводит к завихренности. Среднее  $\langle \mathbf{v}\varpi \rangle$  зависит от координат внутри когерентного вихря, и, следовательно, его дивергенция отлична от нуля. Это является причиной, по которой следует включить этот член в уравнение (11).

Вследствие условия несжимаемости  $\nabla \mathbf{v} = 0$  можно ввести функцию тока  $\psi$ , связанную с компонентами скорости и завихренностью как

$$v_1 = \frac{\partial \psi}{\partial x_2}, \quad v_2 = -\frac{\partial \psi}{\partial x_1}, \quad \varpi = -\nabla^2 \psi. \quad (12)$$

Чтобы восстановить скорость флуктуирующего течения  $\mathbf{v}$  из поля завихренности  $\varpi$ , необходимо решить уравнение Лапласа  $\nabla^2 \psi = -\varpi$ , а затем вычислить компоненты скорости в соответствии с уравнением (12). Подчеркнем, что функция тока  $\psi$ , введенная уравнением (12), относится к флуктуирующей компоненте течения.

В квазилинейном приближении момент третьего порядка  $\langle \varpi^3 \rangle$  равен нулю. Чтобы найти ненулевой вклад в момент  $\langle \varpi^3 \rangle$ , необходимо учитывать взаимодействие между флуктуациями течения, связанными с нелинейным членом в уравнении Навье–Стокса. В нашей постановке необходимо использовать нелинейное уравнение (11), где взаимодействие описывается членом второго порядка  $\mathbf{v}\nabla\varpi$ .

Все наши вычисления выполняются при условии  $\Sigma > 0$ . Однако результаты могут быть легко распространены на отрицательные  $\Sigma$ . Скажем, простые рассуждения о симметрии показывают, что третий момент  $\langle \varpi^3 \rangle$  меняет свой знак при  $\Sigma \rightarrow -\Sigma$ . Что касается парной корреляционной функции  $\langle \varpi(t, \mathbf{x})\varpi(0, \mathbf{y}) \rangle$ , преобразование  $\Sigma \rightarrow -\Sigma$  означает, что следует изменить знак второй компоненты,  $x_2 \rightarrow -x_2$ ,  $y_2 \rightarrow -y_2$ , не касаясь  $x_1, y_1$ .

### 3. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

Взаимодействие флуктуаций течения может быть последовательно изучено в рамках диаграммной техники Уайлда [20], основанной на динамическом уравнении (11). Метод построения диаграмм может быть получен из представления корреляционных функций завихренности  $\varpi$  в виде функциональных интегралов по  $\varpi$  и вспомогательному полю  $\mu$  с весом  $\exp(-\mathcal{I})$  [21], где

$$\mathcal{I} = \mathcal{I}_2 + \mathcal{I}_{int}, \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_2 = & \int dt d^2x \mu (\partial_t + \hat{\mathcal{L}})\varpi + \\ & + \epsilon \int dt d^2x d^2r \nabla^2 \Xi(\mathbf{x} - \mathbf{r}) \mu(t, \mathbf{x}) \mu(t, \mathbf{r}), \end{aligned} \quad (14)$$

$$\mathcal{I}_{int} = \int dt d^2x \mu \mathbf{v} \nabla \varpi. \quad (15)$$

Здесь подразумевается, что скорость  $\mathbf{v}$  выражается через завихренность  $\varpi$ . Особенности используемой техники изложены в обзоре [22].

Парная корреляционная функция завихренности записывается в виде следующего функционального интеграла:

$$\langle \varpi(t, \mathbf{x})\varpi(0, \mathbf{y}) \rangle = \int \mathcal{D}\varpi \mathcal{D}\mu e^{-\mathcal{I}} \varpi(t, \mathbf{x}) \varpi(0, \mathbf{y}). \quad (16)$$

Мы вводим также следующее парное среднее:

$$\langle \varpi(t, \mathbf{x})\mu(0, \mathbf{y}) \rangle = \int \mathcal{D}\varpi \mathcal{D}\mu e^{-\mathcal{I}} \varpi(t, \mathbf{x}) \mu(0, \mathbf{y}). \quad (17)$$

Коррелятор (17) является функцией Грина, поскольку он определяет реакцию системы на дополнительную внешнюю силу. Обратим внимание на то, что среднее  $\langle \mu \mu \rangle$  равно нулю.

Можно развить теорию возмущений для любой корреляционной функции, разложив вес  $\exp(-\mathcal{I})$  по члену третьего порядка  $\mathcal{I}_{int}$  (15) и вычисляя результирующие гауссовы функциональные интегралы. Интегралы выражаются в терминах «голых» корреляционных функций, определяемых квадратичным членом (14):

$$\langle \varpi(t, \mathbf{x})\mu(0, \mathbf{y}) \rangle_0 = \int \mathcal{D}\varpi \mathcal{D}\mu e^{-\mathcal{I}_2} \varpi(t, \mathbf{x}) \mu(0, \mathbf{y}), \quad (18)$$

$$\langle \varpi(t, \mathbf{x})\varpi(0, \mathbf{y}) \rangle_0 = \int \mathcal{D}\varpi \mathcal{D}\mu e^{-\mathcal{I}_2} \varpi(t, \mathbf{x}) \varpi(0, \mathbf{y}). \quad (19)$$

Среднее вида  $\langle \varpi \dots \mu \dots \rangle_0$  определяется теоремой Вика [23] и равно сумме произведений средних значений (18), (19), где спаривание производится всеми

возможными способами. Каждый член ряда возмущений соответствует некоторой диаграмме Фейнмана.

Выражения (14), (18) приводят к следующему уравнению для «голой» функции Грина:

$$(\partial_t + \hat{L})\langle \varpi(t, \mathbf{x})\mu(0, \mathbf{y}) \rangle_0 = \delta(t)\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}). \quad (20)$$

Напомним, что любая функция Грина равна нулю на отрицательных временах в силу принципа причинности. Следовательно,  $\langle \varpi(t, \mathbf{x})\mu(0, \mathbf{y}) \rangle = 0$  при  $t < 0$ . Выражение для «голой» парной корреляционной функции может быть получено с помощью уравнения (19):

$$\begin{aligned} \langle \varpi(t, \mathbf{x})\varpi(0, \mathbf{y}) \rangle_0 &= \\ &= -2\epsilon \int d\tau \int d^2r d^2z \nabla^2 \Xi(\mathbf{r} - \mathbf{z}) \times \\ &\times \langle \varpi(t, \mathbf{x})\mu(\tau, \mathbf{r}) \rangle_0 \langle \varpi(0, \mathbf{y})\mu(\tau, \mathbf{z}) \rangle_0. \end{aligned} \quad (21)$$

Корреляционная функция пропорциональна темпу накачки энергии  $\epsilon$ , как и должно быть.

Из-за наличия сдвигового потока однородность пространства нарушается. Следовательно, парные корреляционные функции зависят от обеих координат. В этом случае преобразование Фурье должно быть выполнено по обеим координатам. Мы определяем преобразование Фурье для функции Грина и функции парной корреляции следующим образом:

$$\langle \varpi(t, \mathbf{x})\mu(0, \mathbf{y}) \rangle_0 = \int \frac{d^2k d^2q}{(2\pi)^4} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - i\mathbf{q}\cdot\mathbf{y}} \mathcal{G}(t, \mathbf{k}, \mathbf{q}), \quad (22)$$

$$\langle \varpi(t, \mathbf{x})\varpi(0, \mathbf{y}) \rangle_0 = \int \frac{d^2k d^2q}{(2\pi)^4} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} + i\mathbf{q}\cdot\mathbf{y}} \mathcal{F}(t, \mathbf{k}, \mathbf{q}). \quad (23)$$

Это определение приводит к удобным для нас правилам.

Для преобразования Фурье  $\mathcal{G}(t, \mathbf{k}, \mathbf{q})$  (22) мы получаем из уравнения (20) следующее дифференциальное уравнение:

$$\begin{aligned} \left( \partial_t - \Sigma k_1 \frac{\partial}{\partial k_2} + \alpha + \nu k_1^2 + \nu k_2^2 \right) \mathcal{G}(t, \mathbf{k}, \mathbf{q}) \times \\ \times (2\pi)^2 \delta(t) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{q}). \end{aligned} \quad (24)$$

Поскольку уравнение (24) первого порядка по производным, оно может быть легко решено методом характеристик, что дает

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(t, \mathbf{k}, \mathbf{q}) &= (2\pi)^2 \theta(t) \delta(k_1 - q_1) \delta(k_2 - q_2 + \Sigma k_1 t) \times \\ &\times \exp \left( -\alpha t - \nu q_1^2 t - \nu q_2^2 t + \nu \Sigma q_2 q_1 t^2 - \frac{1}{3} \nu \Sigma^2 q_1^2 t^3 \right), \end{aligned} \quad (25)$$

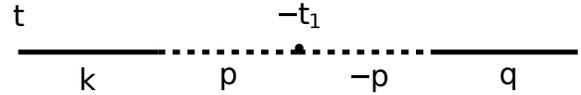


Рис. 1. Диаграмма Фейнмана, представляющая парную корреляционную функцию (27)

где  $\theta(t)$  — ступенчатая функция Хэвисайда.

Из уравнения (9) находим

$$\int d^2x \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \Xi(\mathbf{x}) = \frac{2\pi}{k_f^2} \exp \left( -\frac{\mathbf{k}^2}{2k_f^2} \right). \quad (26)$$

Следовательно, для парной корреляционной функции (21) мы получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(t, \mathbf{k}, \mathbf{q}) &= 2\epsilon \int dt_1 \int \frac{d^2p}{2\pi k_f^2} p^2 \exp \left( -\frac{p^2}{2k_f^2} \right) \times \\ &\times \mathcal{G}(t + t_1, \mathbf{k}, \mathbf{p}) \mathcal{G}(t_1, \mathbf{q}, -\mathbf{p}). \end{aligned} \quad (27)$$

Выражение (27) может быть представлено в виде диаграммы Фейнмана, изображенной на рис. 1. Здесь комбинация сплошной и штриховой линий представляет функцию Грина (22), маркер представляет накачку и подразумевается интегрирование по волновому вектору  $\mathbf{p}$ .

Чтобы найти ненулевой вклад в момент  $\langle \varpi^3 \rangle$ , необходимо учитывать взаимодействие между флуктуациями потока, описываемое членом третьего порядка  $\mathcal{I}_{int}$  (15). Главный вклад в третий момент дает член первого порядка:

$$\langle \varpi^3 \rangle = - \int \mathcal{D}\varpi \mathcal{D}\mu \exp(-\mathcal{I}_2) \varpi^3 \mathcal{I}_{int}. \quad (28)$$

Используя теорему Вика, находим

$$\begin{aligned} \langle \varpi^3 \rangle &= -6 \int dt d^2x \langle \varpi(0, \mathbf{0})\mu(t, \mathbf{x}) \rangle_0 \times \\ &\times \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \langle \varpi(0, \mathbf{0})\varpi(t, \mathbf{x}) \rangle_0 \langle \varpi(0, \mathbf{0})\mathbf{v}(t, \mathbf{x}) \rangle_0. \end{aligned} \quad (29)$$

Выражение (29) можно переписать через функцию тока, определенную соотношениями (12). Тогда

$$\begin{aligned} \langle \varpi^3 \rangle &= 6 \int_0^\infty dt \int dx_1 dx_2 \langle \varpi(t, \mathbf{0})\mu(0, \mathbf{x}) \rangle_0 \times \\ &\times \left[ -\frac{\partial}{\partial x_1} \langle \varpi(t, \mathbf{0})\varpi(0, \mathbf{x}) \rangle_0 \frac{\partial}{\partial x_2} \langle \varpi(t, \mathbf{0})\psi(0, \mathbf{x}) \rangle_0 + \right. \\ &\left. + \frac{\partial}{\partial x_2} \langle \varpi(t, \mathbf{0})\varpi(0, \mathbf{x}) \rangle_0 \frac{\partial}{\partial x_1} \langle \varpi(t, \mathbf{0})\psi(0, \mathbf{x}) \rangle_0 \right]. \end{aligned} \quad (30)$$

Здесь мы приняли во внимание, что корреляционные функции зависят от разности времен и что функция Грина равна нулю в отрицательные моменты времени  $t$  из-за причинности.

**4. ПАРНАЯ КОРРЕЛЯЦИОННАЯ ФУНКЦИЯ**

Парная корреляционная функция (23) может быть исследована с использованием полученных выражений. Подставляя выражение (27) в уравнение (23), находим

$$\langle \varpi(t, \mathbf{x}) \varpi(0, \mathbf{y}) \rangle_0 = 2\epsilon \int_0^\infty dt_1 \int \frac{d^2 p p^2}{2\pi k_f^2} \times \exp\left(-\frac{p^2}{2k_f^2} + W\right),$$

$$W = -\alpha(t_1 + t_3) - \nu p_1^2(t_1 + t_3) - \nu p_2^2(t_1 + t_3) + \nu \Sigma p_2 p_1 (t_1^2 + t_3^2) - \frac{1}{3} \nu \Sigma^2 p_1^2 (t_1^3 + t_3^3) + i p_1 x_1 + i(p_2 - \Sigma p_1 t_3) x_2 - i p_1 y_1 - i(p_2 - \Sigma p_1 t_1) y_2,$$

где  $t > 0, t_3 = t + t_1$ . Это выражение переписывается как

$$\langle \varpi(t, \mathbf{x}) \varpi(0, \mathbf{y}) \rangle_0 = 2\epsilon k_f \frac{\partial}{\partial k_f} \int \frac{dp_1 dp_2}{2\pi} \times \int_0^\infty dt_1 \exp\left(-\frac{p_1^2 + p_2^2}{2k_f^2} + W\right).$$

Экспонента здесь представляется в виде

$$\exp\left[-\frac{1}{2} \begin{pmatrix} p_1 & p_2 \end{pmatrix} \hat{L} \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \end{pmatrix}\right],$$

где  $\hat{L}$  — матрица с компонентами

$$\begin{aligned} L_{11} &= k_f^{-2} + 2\nu(t_1 + t_3) + \frac{2}{3}\nu\Sigma^2(t_1^3 + t_3^3), \\ L_{12} &= L_{21} = -\nu\Sigma(t_1^2 + t_3^2), \\ L_{22} &= k_f^{-2} + 2\nu(t_1 + t_3). \end{aligned}$$

Определитель  $\hat{L}$  равен

$$\begin{aligned} \det \hat{L} &= k_f^{-4} + k_f^{-2} 4\nu(t_1 + t_3) + \\ &+ k_f^{-2} \frac{2}{3} \nu \Sigma^2 (t_1^3 + t_3^3) + 4\nu^2 (t_1 + t_3)^2 + \\ &+ \frac{1}{3} \nu^2 \Sigma^2 t_1^4 + \frac{4}{3} \nu^2 \Sigma^2 t_1^3 t_3 - \\ &- 2\nu^2 \Sigma^2 t_1^2 t_3^2 + \frac{4}{3} \nu^2 \Sigma^2 t_1 t_3^3 + \frac{1}{3} \nu^2 \Sigma^2 t_3^4. \end{aligned} \quad (31)$$

Интегрируя по  $p_1, p_2$ , находим

$$\langle \varpi(t, \mathbf{x}) \varpi(0, \mathbf{y}) \rangle_0 = 2\epsilon k_f \frac{\partial}{\partial k_f} \times \int_0^\infty dt_1 \exp[-\alpha(t_1 + t_3)] (\det \hat{L})^{-1/2} \times$$

$$\times \exp\left[-\frac{1}{2}(x_1 - \Sigma t_3 x_2 - y_1 + \Sigma t_1 y_2)^2 [p_1^2] - \frac{1}{2}(x_2 - y_2)^2 [p_2^2] - (x_1 - \Sigma t_3 x_2 - y_1 + \Sigma t_1 y_2)(x_2 - y_2) [p_1 p_2]\right], \quad (32)$$

где

$$\begin{aligned} [p_1^2] &= (\det \hat{L})^{-1} [k_f^{-2} + 2\nu(t_1 + t_3)], \\ [p_2^2] &= \frac{1}{\det \hat{L}} \left[ k_f^{-2} + 2\nu(t_1 + t_3) + \frac{2}{3} \nu \Sigma^2 (t_1^3 + t_3^3) \right], \\ [p_1 p_2] &= (\det \hat{L})^{-1} \nu \Sigma (t_1^2 + t_3^2). \end{aligned}$$

Как и должно быть, корреляционная функция (32) зависит исключительно от  $x_1 - y_1$ .

Прежде всего мы вычисляем второй момент  $\langle \varpi^2 \rangle$ . Полагая  $t = 0, \mathbf{x} = 0, \mathbf{y} = 0$ , из выражения (32) находим

$$\langle \varpi^2 \rangle = 2\epsilon k_f \frac{\partial}{\partial k_f} \int_0^\infty dt_1 \exp(-2\alpha t_1) (\det \hat{L})^{-1/2}, \quad (33)$$

где  $t_3 = t_1$ . Как мы увидим,  $t_1 \sim \tau_*$ . Пренебрегая членами порядка  $\nu k_f^2 t_1 \ll 1$ , находим в главном приближении из выражения (31)

$$\det \hat{L} \approx k_f^{-4} + \frac{4}{3} k_f^{-2} \nu \Sigma^2 t_1^3.$$

Подставляя это выражение в уравнение (33), после интегрирования по  $t_1$  находим

$$\langle \varpi^2 \rangle = 2\epsilon k_f^2 \tau_* \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{4}{3}\right)^{2/3} \Gamma\left(\frac{1}{3}\right) \Gamma\left(\frac{7}{6}\right). \quad (34)$$

При этих вычислениях мы заменили  $\exp(-2\alpha t_1)$  на единицу, поскольку  $\alpha \tau_* \ll 1$ .

Рассмотрим случай, когда  $\mathbf{x} = \mathbf{y} = 0$  и  $t \gg \tau_*$ . Тогда

$$\begin{aligned} \langle \varpi(t, \mathbf{0}) \varpi(0, \mathbf{0}) \rangle_0 &= \\ &= 2\epsilon k_f \frac{\partial}{\partial k_f} \int_0^\infty dt_1 \frac{\exp[-\alpha(t_1 + t_3)]}{(\det \hat{L})^{1/2}}, \end{aligned} \quad (35)$$

где  $t_3 = t + t_1$ . Таким образом  $t_1 \sim t$  и

$$\det \hat{L} \approx k_f^{-2} \frac{2}{3} \nu \Sigma^2 [t_1^3 + (t + t_1)^3]. \quad (36)$$

Приближение корректно при условии  $t \ll (\nu k_f^2)^{-1}$ . Так как  $\alpha \lesssim \nu k_f^2$ , мы снова можем заменить  $\exp(-2\alpha t_1)$  на единицу в уравнении (35). Тогда находим

$$\langle \varpi(t, \mathbf{0}) \varpi(0, \mathbf{0}) \rangle = \sqrt{6} c_1 \frac{\epsilon k_f^2 \tau_*^{3/2}}{t^{1/2}}, \quad (37)$$

где  $c_1$  — численный фактор,

$$c_1 = \int_0^\infty \frac{ds}{\sqrt{(1+s)^3 + s^3}} \approx 1.6969. \quad (38)$$

Выражение (37) справедливо, если

$$\tau_* \ll t \ll (\nu k_f^2)^{-1}.$$

При  $t \sim \tau_*$  оно переходит в выражение (34).

Если  $t = 0$ , то парная корреляционная функция зависит от разности  $\mathbf{x} - \mathbf{y}$ . Поэтому можно положить  $\mathbf{y} = 0$ , что дает

$$\langle \varpi(0, \mathbf{x}) \varpi(0, \mathbf{0}) \rangle_0 = 2\epsilon k_f \frac{\partial}{\partial k_f} \int_0^\infty dt_1 \frac{\exp(-B)}{(\det \hat{L})^{1/2}}, \quad (39)$$

где

$$\begin{aligned} \det \hat{L} &= k_f^{-4} + 8k_f^{-2} \nu t_1 + \frac{4}{3} k_f^{-2} \nu \Sigma^2 t_1^3 + \\ &+ 8\nu^2 t_1^2 + \frac{4}{3} \nu^2 \Sigma^2 t_1^4, \\ B &= \frac{1}{2} (x_1 - \Sigma t_1 x_2)^2 [p_1^2] + \frac{1}{2} x_2^2 [p_2^2] + \\ &+ (x_1 - \Sigma t_1 x_2) x_2 [p_1 p_2], \end{aligned} \quad (40)$$

т. е.

$$\begin{aligned} B &= (2 \det \hat{L})^{-1} \left\{ [k_f^{-2} + 4\nu t_1] x_1^2 - \right. \\ &- 2\Sigma t_1 [k_f^{-2} + 2\nu t_1] x_1 x_2 + [k_f^{-2} + 4\nu t_1 + \\ &\left. + \Sigma^2 t_1^2 k_f^{-2} + \frac{4}{3} \nu \Sigma^2 t_1^3] x_2^2 \right\}. \end{aligned} \quad (41)$$

Мы рассмотрим различные области, соответствующие различным характерным значениям  $t_1$ . В любом случае мы полагаем  $\alpha t_1 \ll 1$  и потому опускаем в выражении (39) множитель  $\exp(-2\alpha t_1)$ .

Рассмотрим случай  $x_1 = 0$ . Если  $k_f |x_2| \gg 1$ , то выражение (39) экспоненциально мало. Поэтому мы анализируем противоположный случай. Если  $k_f |x_2| \ll (\Sigma \tau_*)^{-1}$ , то зависимостью  $\langle \varpi(0, \mathbf{x}) \varpi(0, \mathbf{0}) \rangle$  от  $x_2$  можно пренебречь, и мы возвращаемся к выражению для парного момента (34). Поэтому мы рассматриваем область

$$1 \gg k_f |x_2| \gg (\Sigma \tau_*)^{-1}, \quad (42)$$

где реализуется степенное поведение. Существуют две различные области интегрирования по  $t_1$  в выражении (39): малые  $t_1$  и большие  $t_1$ , где набираются главные вклады в  $\langle \varpi(0, \mathbf{x}) \varpi(0, \mathbf{0}) \rangle$ .

В первой области (малые  $t_1$ ) главным членом в фигурных скобках в выражении (41) является  $\Sigma^2 t_1^2 k_f^{-2} x_2^2$ . Из выражений (40), (41) в главном приближении находим

$$\det \hat{L} = k_f^{-4}, \quad B = \frac{1}{2} \Sigma^2 t_1^2 k_f^2 x_2^2. \quad (43)$$

Следовательно, характерное значение времен  $t_1$  есть

$$t_1 \sim (\Sigma k_f x_2)^{-1}.$$

Далее из уравнения (42) находим

$$\Sigma^{-1} \ll t_1 \ll \tau_*. \quad (44)$$

Неравенства (44) оправдывают выражения (43). Подставляя выражения (43) в уравнение (39), находим вклад малых  $t_1$ :

$$\langle \varpi(0, \mathbf{x}) \varpi(0, \mathbf{0}) \rangle_s = \sqrt{2\pi} \frac{2\epsilon k_f}{\Sigma |x_2|}. \quad (45)$$

Второй вклад происходит от области больших  $t_1$ , где главные вклады в определитель (40) и в величину (41) даются выражениями

$$\det \hat{L} = \frac{4}{3k_f^2} \nu \Sigma^2 t_1^3, \quad B = \frac{3}{8} (\nu t_1)^{-1} x_2^2. \quad (46)$$

Поэтому характерное  $t_1$  оценивается как  $t_1 \sim \nu^{-1} x_2^2$ , и мы находим из уравнения (42)

$$(\nu k_f^2)^{-1} \gg t_1 \gg \tau_*. \quad (47)$$

Неравенства (47) оправдывают выражения (46). Подставляя выражения (46) в уравнение (39), находим то же самое выражение (48). Итак, при  $x_1 = 0$  ответ (48) должен быть удвоен:

$$\langle \varpi(0, \mathbf{x}) \varpi(0, \mathbf{0}) \rangle = \sqrt{2\pi} \frac{4\epsilon k_f}{\Sigma |x_2|}, \quad (48)$$

На границе  $k_f |x_2| \sim (\Sigma \tau_*)^{-1}$  выражение (48) сшивается с выражением для второго момента (34).

Теперь мы приступаем к рассмотрению случая  $x_1 \neq 0, x_2 = 0$ . Если  $k_f |x_1| \ll 1$ , то мы возвращаемся к выражению для второго момента (34) для корреляционной функции (39). Поэтому мы анализируем область

$$1 \ll k_f |x_1| \ll \Sigma (\nu k_f^2)^{-1}, \quad (49)$$

где корреляционная функция (39) обладает степенным поведением. По аналогии с приведенным выше анализом, можно рассмотреть вклады малых и больших  $t_1$ . Так как  $k_f |x_1| \gg 1$ , подынтегральное

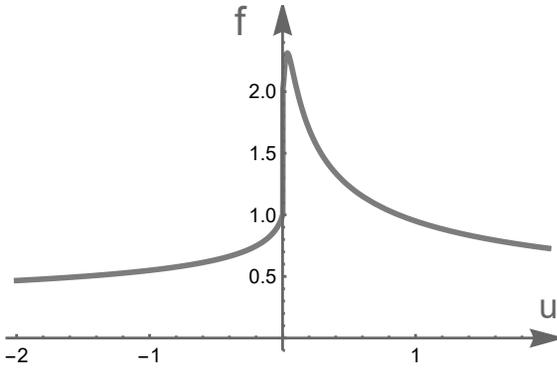


Рис. 2. График функции  $f(u)$  (54)

выражение в (39) становится экспоненциально малым при малых  $t_1$ . Следовательно, этим вкладом можно пренебречь.

Теперь мы переходим к вкладу больших  $t_1$ , тогда главные вклады в определитель (40) и величину (41) записываются как

$$\det \hat{L} = \frac{4}{3k_f^2} \nu \Sigma^2 t_1^3, \quad B = \frac{3}{8} \frac{x_1^2}{\nu \Sigma^2 t_1^3}. \quad (50)$$

Мы заключаем, что характерное значение  $t_1$  определяется как  $t_1 \sim x_1^{2/3} (\nu \Sigma^2)^{-1/3}$ . В этом случае неравенства (49) диктуют ту же область (47) для  $t_1$ . Неравенства (47) оправдывают выражение (50). Подставляя выражение (50) в уравнение (39) и беря интеграл по  $t_1$ , находим

$$\langle \varpi(0, \mathbf{x}) \varpi(0, \mathbf{0}) \rangle = \Gamma\left(\frac{7}{6}\right) \frac{2^{3/2} 3^{1/3} \epsilon k_f}{\Sigma^{2/3} \nu^{1/3} |x_1|^{1/3}}. \quad (51)$$

При граничном значении  $x_1 \sim k_f^{-1}$  выражение (51) сшивается с выражением для второго момента (34).

Теперь мы обобщаем наш анализ, считая, что обе координаты,  $x_1$  и  $x_2$ , не равны нулю и удовлетворяют неравенствам (42), (49). Тогда вклад в  $\langle \varpi(0, \mathbf{x}) \varpi(0, \mathbf{0}) \rangle$  от малых  $t_1$  отсутствует (является экспоненциально малым), поэтому мы концентрируемся на вкладе от больших  $t_1$ , определяемых тем же условием (47). Тогда главные вклады в детерминант (40) и в величину (41) записываются как

$$\det \hat{L} = \frac{4}{3k_f^2} \nu \Sigma^2 t_1^3, \quad B = \frac{3}{8} \frac{(x_1 - \Sigma t_1 x_2)^2}{\nu \Sigma^2 t_1^3}. \quad (52)$$

Отметим, что выражение (52) является обобщением выражений (46), (50).

Подставляя выражения (52) в уравнение (39) и переходя к безразмерной переменной  $\vartheta$ ,  $\vartheta = \nu t_1 / x_2^2$ , получаем

$$\langle \varpi(0, \mathbf{x}) \varpi(0, \mathbf{0}) \rangle = \sqrt{2\pi} \frac{2\epsilon k_f}{\Sigma |x_2|} f\left(\frac{\nu x_1}{\Sigma x_2^3}\right), \quad (53)$$

$$f(u) = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty \frac{d\vartheta}{\vartheta^{3/2}} \exp\left[-\frac{3}{8\vartheta} \left(1 - \frac{u}{\vartheta}\right)^2\right]. \quad (54)$$

Здесь  $f(-0) = 1$ , и мы воспроизводим выражение (45). Если  $|u| \gg 1$ , то

$$f \approx \frac{3^{1/3} \Gamma(7/6)}{\sqrt{\pi} |u|^{1/3}}, \quad (55)$$

что воспроизводит выражение (51). Функция  $f(u)$  изображена на рис. 2. Надо быть аккуратным при малых  $u$ : функция  $f(u)$  испытывает скачок при  $u = 0$ , который виден на рис. 2. Скачок объясняется конечным вкладом в интеграл в выражении (54) при малых положительных  $u$ , который происходит из области интегрирования  $\vartheta \sim u$ , при отрицательных  $u$  такой вклад отсутствует. Подчеркнем, что в соответствии с (42), (49)  $|u|$  не может быть меньше, чем  $\nu k_f^2 / \Sigma$ . Поэтому область  $|u| \lesssim \nu k_f^2 / \Sigma$  покрывается выражениями (53), (54).

### 5. ТРЕТИЙ МОМЕНТ ЗАВИХРЕННОСТИ

Главный вклад в третий момент завихренности определяется выражением (30). Удобно ввести преобразование Фурье для функций, которые входят в это выражение:

$$F(t, \mathbf{q}) = \int d^2x \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}) \langle \varpi(t, \mathbf{0}) \varpi(0, \mathbf{x}) \rangle_0, \quad (56)$$

$$\Phi(t, \mathbf{k}) = \int d^2x \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \langle \varpi(t, \mathbf{0}) \psi(0, \mathbf{x}) \rangle_0, \quad (57)$$

$$G(t, \mathbf{p}) = \int d^2x \exp(i\mathbf{p}\mathbf{x}) \langle \varpi(t, \mathbf{0}) \mu(0, \mathbf{x}) \rangle_0. \quad (58)$$

В терминах величин (56)–(58) выражение (30) может быть переписано как

$$\langle \varpi^3 \rangle = 6 \int_0^\infty dt \int \frac{d^2q d^2k}{(2\pi)^4} (q_1 k_2 - q_2 k_1) \times \\ \times F(t, \mathbf{q}) \Phi(t, \mathbf{k}) G(t, \mathbf{q} + \mathbf{k}). \quad (59)$$

Отметим закон сохранения волнового вектора.

Можно выразить величины (56)–(58) через функцию Грина и парную корреляционную функцию  $\varpi$ :

$$G(t, \mathbf{p}) = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} G(t, \mathbf{k}, \mathbf{p}) =$$

$$= \theta(t) \exp \left( -\alpha t - \nu \mathbf{p}^2 t + \nu \Sigma p_2 p_1 t^2 - \frac{1}{3} \nu \Sigma^2 p_1^2 t^3 \right). \quad (60)$$

Отметим, что уравнение (25) переписывается следующим образом:

$$\mathcal{G}(t, \mathbf{k}, \mathbf{q}) = (2\pi)^2 \delta(k_1 - q_1) \times \delta(k_2 - q_2 + \Sigma k_1 t) G(t, \mathbf{q}). \quad (61)$$

Для величины (57) находим

$$F(t, \mathbf{q}) = \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \mathcal{F}(t, \mathbf{k}, \mathbf{q}) = 2\pi \frac{2\epsilon}{k_f^2} \int_0^\infty dt_1 (q_1^2 + q_3^2) \exp \left( -\frac{q_1^2 + q_3^2}{2k_f^2} \right) \times G(t + t_1, q_1, q_3) G(t_1, -q_1, -q_3),$$

где

$$q_3 = q_2 + \Sigma q_1 t_1.$$

Считая  $t > 0$ , находим

$$F(t, \mathbf{q}) = 2\pi \frac{2\epsilon}{k_f^2} \int_0^\infty dt_1 (q_1^2 + q_3^2) \exp \left( -\frac{q_1^2 + q_3^2}{2k_f^2} \right) \times \exp \left[ -(\alpha + \nu q_1^2 + \nu q_3^2)(t_1 + t_3) + \nu \Sigma q_1 q_3 (t_1^2 + t_3^2) - \frac{1}{3} \nu \Sigma^2 q_1^2 (t_1^3 + t_3^3) \right], \quad (62)$$

где

$$t_3 = t + t_1, \quad q_3 = q_2 + \Sigma q_1 t_1.$$

Аналогично для  $t > 0$ :

$$\Phi(t, \mathbf{k}) = 2\pi \frac{2\epsilon}{k_f^2} \int_0^\infty dt_2 \frac{k_1^2 + k_3^2}{k_1^2 + k_2^2} \exp \left( -\frac{k_1^2 + k_3^2}{2k_f^2} \right) \times \exp \left[ -(\alpha + \nu k_1^2 + \nu k_3^2)(t_2 + t_4) + \nu \Sigma k_3 k_1 (t_2^2 + t_4^2) - \frac{1}{3} \nu \Sigma^2 k_1^2 (t_2^3 + t_4^3) \right], \quad (63)$$

где

$$t_4 = t + t_2, \quad k_3 = k_2 + \Sigma k_1 t_2.$$

Чтобы найти главный вклад в третий момент, следует подставить выражения (60), (62), (63) в выражение (59) и вычислить получившиеся интегралы. Этот вклад представлен фейнмановской диаграммой, изображенной на рис. 3. Обозначения здесь те же, что и на рис. 1: сплошная линия в комбинации со штриховой обозначает функцию Грина

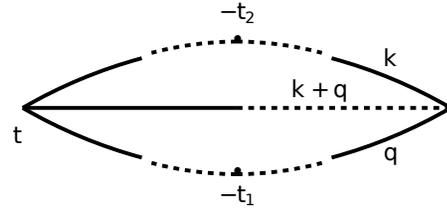


Рис. 3. Диаграмма Фейнмана, представляющая первый вклад в третий момент завихренности

(22), маркер представляет накачку. Далее в уравнении (59) мы переходим к интегрированию по компонентам  $k_1, k_3, q_1, q_3$ . Тогда следует подставить

$$q_2 = q_3 - \Sigma q_1 t_1, \quad k_2 = k_3 - \Sigma k_1 t_2 \quad (64)$$

в выражения (62), (63) для  $F$  и  $\Phi$ . Компоненты  $k_1, k_3, q_1, q_3$  ограничены накачкой и поэтому не могут быть много больше  $k_f$ .

Далее мы изучаем главный вклад в интеграл (59). Как мы увидим, этот вклад происходит из области интегрирования, где  $t, t_1 \gg \tau_*, t_2, k_1, q_1 \ll k_f$ , в то время как  $k_3, q_3 \sim k_f$ . Поэтому мы можем пренебречь  $k_1, q_1$  по сравнению с  $k_3, q_3$ . Затем мы пренебрегаем  $t_2$  по сравнению с  $t, t_1$  и сохраняем только члены третьего порядка по  $t, t_1$  в экспонентах в выражениях (60), (62), (63). Мы также пренебрегаем членами с  $\alpha$ . Тогда

$$G(t, \mathbf{k} + \mathbf{q}) \rightarrow \theta(t) \exp \left[ -\nu \Sigma^2 t_1^2 t q_1^2 - \nu \Sigma^2 t_1 t^2 q_1 (q_1 + k_1) - \frac{1}{3} \nu \Sigma^2 (q_1 + k_1)^2 t^3 \right], \quad (65)$$

$$F(t, \mathbf{q}) \rightarrow 2\pi \frac{2\epsilon}{k_f^2} \int_0^\infty dt_1 q_3^2 \exp \left( -\frac{q_3^2}{2k_f^2} \right) \times \exp \left[ -\frac{1}{3} \nu \Sigma^2 q_1^2 (t_1^3 + t_3^3) \right], \quad (66)$$

$$\Phi(t, \mathbf{k}) = 2\pi \frac{2\epsilon}{k_f^2} \int_0^\infty dt_2 \frac{k_3^2}{k_1^2 + k_2^2} \times \exp \left( -\frac{k_3^2}{2k_f^2} \right) \exp \left[ -\frac{1}{3} \nu \Sigma^2 k_1^2 t^3 \right]. \quad (67)$$

Теперь мы можем явно проинтегрировать по  $t_2$  в выражении (67), что дает

$$\int_0^\infty dt_2 \frac{1}{k_1^2 + (\Sigma t_2 k_1 - k_3)^2} \rightarrow \pi \Sigma^{-1} k_1^{-2} \theta(k_1 k_3). \quad (68)$$

Функция Хэвисайда в выражении (68) означает, что интеграл по  $t_2$  для одинаковых знаков  $k_1, k_3$  много больше, чем для разных знаков  $k_1, k_3$ . Таким образом, из уравнения (67) находим

$$\Phi(t, \mathbf{k}) \rightarrow \frac{(2\pi)^2 \epsilon}{\Sigma k_f^2} \theta(k_1 k_3) \frac{k_3^2}{k_1^2} \exp\left(-\frac{k_3^2}{2k_f^2}\right) \times \exp\left(-\frac{1}{3} \nu \Sigma^2 k_1^2 t^3\right). \quad (69)$$

Подставляя выражения (65), (66), (69) в соотношение (59) и интегрируя по  $k_3, q_3$ , находим

$$\langle \varpi^3 \rangle = 6\epsilon^2 k_f^2 \int_0^\infty dt dt_1 t_1 \int dk_1 dq_1 \frac{q_1}{k_1} \times \exp\left\{-\nu \Sigma^2 \left[\frac{2}{3}(t_1 + t)^2 q_1^2 + \left(t_1 t^2 + \frac{2}{3} t^3\right) q_1 k_1 + \frac{2}{3} t^3 k_1^2\right]\right\}. \quad (70)$$

Выполняя затем интегрирование по  $q_1$ , находим

$$\langle \varpi^3 \rangle = -\frac{6\epsilon^2 k_f^2}{\Sigma \nu^{1/2}} \int_0^\infty dt dt_1 t_1 \int dk_1 \sqrt{2\pi} \frac{b}{a^{3/2}} \times \exp\left\{\nu \Sigma^2 \left[\frac{b^2}{2a} - \frac{2}{3} t^3\right] k_1^2\right\}, \quad (71)$$

где

$$a = \frac{4}{3}(t_1 + t)^3, \quad b = t_1 t^2 + \frac{2}{3} t^3.$$

Интегрируя затем по  $k_1$ , получим

$$\langle \varpi^3 \rangle = -\frac{12\pi \epsilon^2 k_f^2}{\Sigma^2 \nu} \int_0^\infty dt dt_1 t_1 \frac{b/a}{\sqrt{\frac{4}{3} t^3 a - b^2}}. \quad (72)$$

Переходя к переменной  $\eta = t_1/t$ , мы получаем логарифмический интеграл,

$$\langle \varpi^3 \rangle = -\frac{9\pi \epsilon^2 k_f^2}{\Sigma^2 \nu} c_2 \int \frac{d\eta}{\eta}, \quad (73)$$

где  $c_2$  — численный множитель,

$$c_2 = \int_0^\infty d\eta \frac{\eta(3\eta + 2)}{(1 + \eta)^3} (12 + 36\eta + 39\eta^2 + 16\eta^3)^{-1/2},$$

$$c_2 \approx 0.187.$$

Так как  $\eta \sim 1$ , то  $t_1 \sim t$ . Отметим также, что

$$k_1, q_1 \sim (\nu \Sigma^2 t^3)^{-1/2}, \quad (74)$$

это следует из соответствующих интегралов.

Интегрирование по  $t$  в (73) ограничено сверху «вязким» временем  $(\nu k_f^2)^{-1}$ , поскольку при больших временах отброшенные в экспонентах в выражениях (60), (62), (63) члены типа  $\nu k_3^2 t$  становятся существенными. Мы пренебрегли  $k_1, q_1$  по сравнению с  $k_f$ , поэтому  $t \gg \tau_*$ , как следует из соотношения (74). Итак, мы заключаем, что время  $t$  лежит в интервале

$$(\nu k_f^2)^{-1} \gtrsim t \gtrsim \tau_*. \quad (75)$$

В терминах  $q_1, k_1$  интервал (75) принимает вид

$$k_f \gtrsim q_1, k_1 \gtrsim \frac{\nu k_f^2}{\Sigma} k_f, \quad (76)$$

как это вытекает из формулы (74). Отметим, что интеграл (68) набирается вблизи

$$t_2 \approx k_3 (\Sigma k_1)^{-1} \sim k_f (\Sigma k_1)^{-1}. \quad (77)$$

Как следует из соотношений (74), (77), отношение

$$t_2/t \sim (\nu k_f^2 t)^{1/2} \quad (78)$$

мало в интервале (75). Как было продемонстрировано в работе [16], когерентный вихрь формируется при условии  $\alpha \lesssim \nu k_f^2$ . Поскольку членами типа  $\nu k_f^2 t$  можно пренебречь, членами с  $\alpha$  также можно пренебречь. Таким образом, мы обосновали приближения, сделанные при вычислении интеграла (75).

Логарифмический интеграл (73) набирается в широком интервале  $t$ , который определяется условием (75). Чтобы найти этот интеграл, достаточно подставить нижнее и верхнее значения  $t$  из условий (75) как пределы в интеграл (73). В результате мы находим

$$\langle \varpi^3 \rangle = -\frac{6\pi \epsilon^2 k_f^2}{\Sigma^2 \nu} c_2 \ln \frac{\Sigma}{\nu k_f^2} \quad (79)$$

с логарифмической точностью. Напомним, что мы полагали  $\Sigma > 0$  в наших вычислениях. Поэтому знак минус в выражении (79) означает, что третий момент имеет знак, противоположный знаку темпа сдвига  $\Sigma$ .

## 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы аналитически исследовали парную корреляционную функцию флуктуирующей завихренности и ее третий момент внутри когерентного вихря, возникающий как следствие обратного каскада в двумерной турбулентности. Конкретный выбор накачки (внешнего воздействия) позволил нам получить

явные аналитические выражения для объекта. Выражения (34), (37), (48), (51), (53) находятся в соответствии с общим анализом, данным в работе [18].

Одним из новых ингредиентов является логарифм в выражении (79), полученном с логарифмической точностью. Это связано с тем фактом, что третий момент набирается в широкой области времен  $\tau_* < t < (\nu k_f^2)^{-1}$ , в то время как второй момент определяется областью  $t \sim \tau_*$ . Существование широкой области времен, очевидно, универсально, т. е. не зависит от конкретной формы накачки. Роль этой особенности для высоких моментов  $\varpi$  требует дальнейшего исследования.

Стоит отметить, что также существуют флуктуации течения масштаба порядка размера системы  $L$ . Как было показано в работе [24], эти флуктуации вносят существенный вклад в статистику скорости. Однако при условии  $k_f L \gg 1$  их вклад в моменты завихренности мал.

**Финансирование.** Работа одного из авторов (И. В. К.) выполнялась в рамках научной программы Национального центра физики и математики (проект «Физика высоких плотностей энергии. Этап 2023-2025»). Авторы В. В. Л. и М. М. Т. благодарят за поддержку Министерство высшего образования и науки РФ (проект № 075-15-2022-1099) и Фонд Базис.

## ЛИТЕРАТУРА

1. G. Boffetta and R. E. Ecke, *Ann. Rev. Fluid Mech.* **44**, 427 (2012).
2. R. H. Kraichnan, *Phys. Fluids* **10**, 1417 (1967).
3. C. E. Leith, *Phys. Fluids* **11**, 671 (1968).
4. G. K. Batchelor, *Phys. Fluids* **12**, 233 (1969).
5. R. H. Kraichnan and D. Montgomery, *Rep. Prog. Phys.* **43**, 547 (1980).
6. H. Xia, M. Shats, and G. Falkovich, *Phys. Fluids* **21**, 125101 (2009).
7. А. В. Орлов, М. Ю. Бражников, А. А. Левченко, Письма в ЖЭТФ **107**, 166 (2018) [A. V. Orlov, M. Yu. Brazhnikov, and A. A. Levchenko, *JETP Lett.* **107**, 157 (2018)].
8. D. Molenaar, H. J. H. Clercx, and G. J. F. van Heijst, *Physica D* **196**, 329 (2004).
9. M. Chertkov, C. Connaughton, I. Kolokolov, and V. Lebedev, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 084501 (2007).
10. J. Laurie, G. Boffetta, G. Falkovich, I. Kolokolov, and V. Lebedev, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 254503 (2014).
11. И. В. Колоколов, В. В. Лебедев, Письма в ЖЭТФ **101**, 181 (2015) [I. V. Kolokolov and V. V. Lebedev, *JETP Lett.* **101**, 164 (2015)].
12. I. V. Kolokolov and V. V. Lebedev, *Phys. Rev. E* **93**, 033104 (2016).
13. I. V. Kolokolov and V. V. Lebedev, *J. Fluid Mech.* **809**, R2 (2016).
14. A. Frishman, J. Laurie, and G. Falkovich, *Phys. Rev. Fluids* **2**, 032602 (2017).
15. И. В. Колоколов, В. В. Лебедев, Письма в ЖЭТФ **106**, 633 (2017) [I. V. Kolokolov and V. V. Lebedev, *JETP Lett.* **106**, 659 (2017)].
16. I. Kolokolov and V. Lebedev, *Phys. Rev. E* **102**, 023108 (2020).
17. A. N. Doludenko, S. V. Fortova, I. V. Kolokolov, and V. V. Lebedev, *Ann. Phys.* **447**, 169072 (2022).
18. И. В. Колоколов, В. В. Лебедев, М. М. Тумакова, Письма в ЖЭТФ **117**, 127 (2023).
19. M. Souzy, I. Zaier, H. Lhuissier, T. Le Borgne, and B. Metzger, *J. Fluid Mech.* **838**, R3 (2018).
20. H. W. Wyld, *Ann. Phys.* **14**, 134 (1961).
21. P. C. Martin, E. D. Siggia, and H. A. Rose, *Phys. Rev. A* **8**, 423 (1973).
22. J. Hertz, Y. Roudi, and P. Sollich, *J. Phys. A* **50**, 033001 (2017).
23. G. C. Wick, *Phys. Rev.* **80**, 268 (1950).
24. A. Frishman, *Phys. Fluids* **29**, 125102 (2017).

## АЛФАВИТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ ТОМА 163 ЗА 2023 Г.

	Вып. Стр.		Вып. Стр.
EDN: DICXJW			
<b>А</b>			
Абдиганиева С. Б., Берлев А. И., Бочков М. А., Лиховид Н. А., Пантуев В. С., Задорожный С. В. Калибровка считывающей электроники детектора "Троицк ню-масс" с использованием цифровых фильтров сигналов .....	5 641	Аринин В. А. (см. Мочалов М. А.) .....	3 439
Абдуллаев Г.О. (см. Алисултанов З.З.)	3 401	Афонин В. В. Жидкость Латтинжера с притяжением и одной примесью: точное решение .....	2 238
Абдуллин А. Ф. (см. Воронина Е. В.)	1 106	<b>Б</b>	
Авакянц Л. П. (см. Бурмистров Е. Р.)	5 669	Бабенко П. Ю. (см. Зиновьев А. Н.) ...	5 744
Аверкиев Н. С. (см. Сарычев М. Н.)	1 96	Бакулин А. В., Чумакова Л. С., Кулькова С. Е. Влияние примесей на адсорбцию кислорода на поверхности $Ti_5Si_3(0001)$ .....	6 796
Азаревич А. Н. (см. Случанко Н. Е.)	2 172	Бакшт Е. Х. (см. Козырев А. В.) .....	2 284
Азаров И. А. (см. Исламов Д. Р.) .....	3 392	Балагуров Б. Я. О гальваномагнитных свойствах двумерной модели Рэлея .....	3 387
Алещенко Ю. А. (см. Случанко Н. Е.)	2 172	Балаев Д. А. (см. Красиков А. А.) .....	1 115
Алисултанов З.З., Абдуллаев Г.О., Григорьев П.Д., Демиров Н.А. Квантовые осцилляции межслойной проводимости в многослойном топологическом изоляторе .....	3 401	Баранцев К. А., Волошин Г. В., Куращев А. С., Литвинов А. Н., Соколов И. М. Форма спектра и световой сдвиг резонанса когерентного пленения населенностей в ячейках с антирелаксационным покрытием стенок в моделях зеркального и диффузного отражения ..	2 162
Алябьева Л. Н. (см. Случанко Н. Е.)	2 172	Бабенин Н. Г. (см. Ясюлевич И. А.) ...	4 574
Анашкин Н. Н. (см. Жерноклетов М. В.)	2 260	Бибихов Ю. В. (см. Полетаев Г. М.) ...	4 537
Анисимов М. А. (см. Случанко Н. Е.)	2 172	Бегинин Е. Н. (см. Губанова Ю. А.) ...	1 125
Антропов А. С. (см. Лобашев Е. А.) ...	2 201	Белик А. А. (см. Ниценко В. И.) .....	5 698
Аржников А. К. (см. Воронина Е. В.)	1 106		
Аринин В. А. (см. Жерноклетов М. В.)	2 260		

- Белослудов В. Р., Гец К. В., Жданов Р. К., Божко Ю. Ю., Кавазое Ё. Изучение влияния замещения  $\text{H}_2\text{O}$  на  $\text{T}_2\text{O}$  на динамические свойства, максимум плотности и температуру плавления льда  $I_h$  в рамках метода решёточной динамики ..... 4 531
- Бельская Н. А. (см. Мошкина Е. М.) .. 1 24
- Беляев В. С., Загреев В. С., Крайнов В. П., Матафонов А. П. Пространственная структура плазменных потоков в магнитных полях лазерной плазмы ..... 3 309
- Берлев А. И. (см. Абдиганиева С. Б.) .. 5 641
- Бликов А. О. (см. Жерноклетов М. В.) 2 260
- Бликов А. О. (см. Мочалов М. А.) ..... 3 439
- Бовина А. Ф. (см. Мошкина Е. М.) .... 1 24
- Божко Ю. Ю. (см. Белослудов В. Р.) .. 4 531
- Боков А. В., Магницкая М. В., Саламатин Д. А., Цвященко А. В. 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 .... 3 350
- Бочков М. А. (см. Абдиганиева С. Б.) . 5 641
- Бражкин В. В. (см. Циок О. Б.) ..... 4 585
- Бричкин А. С., Голышков Г. М., Черненко А. В. Влияние толщины инкапсулирующих слоев на качество гетероструктур на основе  $\text{MoSe}_2$  ..... 6 852
- Булыгин Ф. В. (см. Ружицкая Д. Д.) .. 6 786
- Бурмистров Е. Р., Авакянц Л. П. Тергерцевая спектроскопия с временным разрешением (THz-TDS) светодиодных гетероструктур с тремя и пятью квантовыми ямами  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  ..... 5 669
- Бычков Е. В. (см. Циок О. Б.) ..... 4 585
- В**
- Валиев Э. З. Критическая точка на кривой магнитных фазовых переходов первого рода ..... 3 344
- Васильев Р. Б. (см. Гаврилов С. Ю.) .. 5 621
- Вахитов Р. М. (см. Магадеев Е. Б.) .... 1 78
- Ведяев А. В. (см. Стрелков Н. В.) ..... 4 597
- Великанов Д. А. (см. Мошкина Е. М.) 1 24
- Вергелес С. С. (см. Ивченко Н. А.) .... 5 724
- Вещунов М.С. К теории нуклеации ионных солей из водных растворов ..... 6 830
- Виноградов Н. П. (см. Козырев А. В.) 2 284
- Виноградова А. С. (см. Шарова О. А.) 1 14
- Вишняков О. И. (см. Поливанов П. А.) 5 717
- Волошин Г. В. (см. Баранцев К. А.) ... 2 162
- Воробьев К. А. (см. Ружицкая Д. Д.) . 6 786
- Воронина Е. В., Абдуллин А. Ф., Иванова А. Г., Добышева Л. В., Королёв А. В., Аржников А. К. Особенности синтеза и магнитная микроструктура тройных упорядоченных сплавов Fe-Al-M (M = Ga, V, Sn, V, Mn) ..... 1 106

## Г

- Гаврилов С. Ю., Смирнов А. М., Козлова М. В., Васильев Р. Б., Днепровский В. С. Нелинейное поглощение и фотолюминесценция нанотетраподов CdTe с наконечниками CdSe при нерезонансном возбуждении экситонов ..... 5 621
- Гаранин С. Ф., Кравец Е. М. Растекание тока в тонких фольгах или плоских токовых слоях ..... 4 480
- Гареева З. В., Шульга Н. В., Шаррафуллин И. Ф., Дорошенко Р. А., Звездин А. К. Гистерезис намагниченности и электрической поляризации в магнитных наноструктурах со взаимодействием Дзялошинского–Мория ..... 1 66
- Гейвандов А. Р. (см. Лазарев В. В.) ... 2 153
- Гец К. В. (см. Белослудов В. Р.) ..... 4 531
- Гисматулин А. А. (см. Исламов Д. Р.) 3 392
- Глазкова Я. С. (см. Ниценко В. И.) ..... 5 698
- Голубков М. В., Степанов В. А., Садаков А. В., Усольцев А. С., Морозов И. В. Исследование контактов Джозефсона  $Pb_{0.6}In_{0.4}/KFe_2As_2$  и  $KFe_2As_2/KFe_2As_2$ . Проверка симметрии параметра порядка ..... 2 180
- Гольшников Г. М. (см. Бричкин А. С.) .. 6 852
- Горшунов Б. П. (см. Случанко Н. Е.) . 2 172
- Грачев А. А., Садовников А. В. Управляемая лазерным излучением спиноволновая интерференция в нерегулярной магнитной структуре ..... 1 72
- Григорьев П. Д. (см. Алисултанов З. З.) 3 401
- Григорьев С. В., Шнырков О. Д., Пшеничный К. А., Пустовойт П. М., Яшина Е. Г. Модель фрактальной организации хроматина в двумерном пространстве ..... 3 428
- Гриценко В. А. (см. Исламов Д. Р.) ... 3 392
- Грум-Гржимайло А. Н. (см. Попова М. М.) ..... 3 297
- Грызлова Е. В. (см. Попова М. М.) .... 3 297
- Грязнов В. К. (см. Жерноклетов М. В.) ) 2 274
- Грязнов В. К. (см. Мочалов М. А.) ..... 3 439
- Губанов В. А. (см. Губанова Ю. А.) ... 1 125
- Губанова Ю. А., Губанов В. А., Бегинин Е. Н., Садовников А. В. Формирование полос непропускания спиноволнового сигнала в меандровых структурах из ЖИГ ..... 1 125
- Гудков В. В. (см. Сарычев М. Н.) ..... 1 96
- Гуленко А. С. (см. Мельников Н. Б.) .. 1 35
- Гусев Н. С. (см. Караштин Е. А.) ..... 1 5

## Д

- Давыдов А. И. (см. Жерноклетов М. В.) ) 2 260
- Давыдов Н. Б. (см. Жерноклетов М. В.) ) 2 260
- Дворецкая Е. В. (см. Кошляк О. В.) ... 2 214
- Дегтярев А. В. (см. Жерноклетов М. В.) ) 2 260
- Демиров Н. А. (см. Алисултанов З. З.) . 3 401
- Днепровский В. С. (см. Гаврилов С. Ю.) ..... 5 621
- Добышева Л. В. (см. Воронина Е. В.) . 1 106
- Дорошенко Р. А. (см. Гареева З. В.) .. 1 66

Дубрович В. К., Залялютдинов Т. А.  
Эффекты конечного времени в одинарном  
и двойном комптоновском рассеянии ... 6 771

## Е

Елфимова Е. А. (см. Радужнов Д. И.) 1 87  
Еремин Е. В. (см. Мошкина Е. М.) .... 1 24  
Ерунов С. В. (см. Мочалов М. А.) ..... 3 439  
Ерыженков А. В. (см. Макарова Т. П.) 5 708

## Ж

Жданов Р. К. (см. Белослудов В. Р.) .. 4 531  
Жевстовских И. В. (см. Сарычев М. Н.) 1 96  
**Жерноклетов М. В.**, Ковалев А. Е.,  
Новиков М. Г., Грязнов В. К., Иоси-  
левский И. Л., Шутов А. В. Ударно-  
волновое сжатие азотного флюида в диа-  
пазоне давлений 140–250 ГПа ..... 2 274

**Жерноклетов М. В.**, Манач-  
кин С. Ф., Давыдов Н. Б.,  
**Раевский В. А.**, Бликов А. О., Па-  
нов К. Н., Рыжков А. В., Ари-  
нин В. А., Ткаченко Б. И., Логви-  
нов А. И., Дегтярев А. В., Комра-  
ков В. А., Давыдов А. И., Анаш-  
кин Н. Н., Хрусталева В. В. Квазииз-  
энтропическое сжатие газообразных гелия  
и дейтерия в сферических конструкциях  
при терапаскальных давлениях ..... 2 260  
Жукова Е. С. (см. Случанко Н. Е.) .... 2 172

## З

Загребев В. С. (см. Беляев В. С.) ..... 3 309

Задорожный С. В. (см. Абдигание-  
ва С. Б.) ..... 5 641

Залялютдинов Т. А. (см. Дубро-  
вич В. К.) ..... 6 771

Захаров Б. Г. Охлаждение струй для  
тяжелых флейворов в АА- и рр-  
столкновениях ..... 5 646

Звездин А. К. (см. Гареева З. В.) ..... 1 66

Зиновьев А. Н., Бабенко П. Ю., Шер-  
гин А. П. Образование и распад автоио-  
низационных состояний — основной меха-  
низм неупругих потерь при столкновениях  
атомов кэВ-энергий ..... 5 744

Зубарев А. Ю., Мусихин А. Ю. Макро-  
скопические течения, индуцируемые фер-  
рожидкостью под действием вращающего-  
ся магнитного поля ..... 4 602

## И

Иванова А. Г. (см. Воронина Е. В.) .... 1 106

Ивченко Н. А., Вергелес С. С. Ста-  
тистика пассивного скаляра в двумерном  
сдвиговом течении с флуктуациями .... 5 724

Игнатченко В. А., Цикалов Д. С., По-  
лухин Д. С. Высокочастотная воспри-  
имчивость ферромагнитного резонанса в  
тонких пленках со случайными 1D- и  
2D-неоднородностями величины магнит-  
ной анизотропии ..... 1 50

Илькаев Р. И. (см. Мочалов М. А.) ..... 3 439

Иосилевский И. Л. (см. **Жерноклетов М. В.**) 2 274

Иосилевский И. Л. (см. Мочалов М. А.) 3 439

- Ипатов А. Н.** Дипольная плазменная мода в наноразмерных полупроводниковых квантовых точках типа «ядро-оболочка» с гетеропереходом второго рода ..... 6 858
- Исламов Д. Р., Перевалов Т. В., Гисматулин А. А., Азаров И. А., Спесивцев Е. В., Гриценко В. А.** Механизм поперечного транспорта заряда в тонких пленках гексагонального нитрида бора ..... 3 392
- К**
- Кавазое Ё.** (см. Белослудов В. Р.) ..... 4 531
- Камчатнов А. М.** Эволюция нелинейных волновых импульсов в теории уравнения синус-Гордон ..... 5 734
- Канбеков Р. Р.** (см. Магадеев Е. Б.) ... 1 78
- Караштин Е. А., Гусев Н. С., Пашенькин И. Ю., Сапожников М. В., Фраерман А. А.** Эффект Холла в туннельных магнитных контактах ..... 1 5
- Килин С. Я.** (см. Эскандери М. М.) ... 4 467
- Киселев А. В.** (см. Юдаев А. В.) ..... 2 131
- Киселев В. В.** Нелинейная динамика гейзенберговского ферромагнетика на полуоси ..... 3 375
- Киселев М. Д.** (см. Попова М. М.) .... 3 297
- Кисловский В. А.** (см. Поливанов П. А.) 5 717
- Ковалев А. Е.** (см. Жерноклетов М. В.) 2 274
- Ковалев А. Е.** (см. Мочалов М. А.) ..... 3 439
- Кожевников В. Ю.** (см. Козырев А. В.) 2 284
- Козлова М. В.** (см. Гаврилов С. Ю.) .. 5 621
- Козырев А. В., Коковин А. О., Кожевников В. Ю., Тарасенко В. Ф., Бакшт Е. Х., Виноградов Н. П.** Эволюция отрицательной короны в режиме ограничения тока разряда: переход от импульсно-периодического режима к стационарному горению ..... 2 284
- Коковин А. О.** (см. Козырев А. В.) .... 2 284
- Колоколов И. В., Лебедев В. В., Тумакова М. М.** Корреляции завихренности внутри когерентного вихря ..... 6 881
- Комарова А. А.** (см. Юдаев А. В.) .... 2 131
- Комраков В. А.** (см. Жерноклетов М. В.) 2 260
- Комраков В. А.** (см. Мочалов М. А.) ... 3 439
- Коплак О. В., Дворецкая Е. В., Кунцына Е. И., Моргунов Р. Б.** Взаимодействие комплексов одноионных магнитов  $[Er(HL)(L)] \cdot 4CHCl_3 \cdot H_2O$  с ферромагнитными микрочастицами ..... 2 214
- Королёв А. В.** (см. Воронина Е. В.) ... 1 106
- Коростелин Ю. В.** (см. Сарычев М. Н.) 1 96
- Кох Д.** (см. Мошкина Е. М.) ..... 1 24
- Кравец Е. М.** (см. Гаранин С. Ф.) ..... 4 480
- Крайнов В. П.** (см. Беляев В. С.) ..... 3 309
- Красиков А. А., Балаев Д. А.** Исследование процессов намагничивания антиферромагнитных наночастиц в сильных импульсных полях (миниобзор) ..... 1 115
- Крачков П. А., Терехов И. С.** К задаче о связанном состоянии электрона и дырки в диалъкогенидах переходных металлов 2 227
- Крылов А. С.** (см. Мошкина Е. М.) .... 1 24
- Кузин А. Ю.** (см. Ружицкая Д. Д.) .... 6 786

- Кулагин Н. Е. Динамическая трансформация доменных стенок в киральных ферромагнетиках ..... 3 357
- Кулеева Н. А. (см. Кучинский Э. З.) ... 3 417
- Кулешов Д. А. (см. Куринов К. О.) ... 4 524
- Кулькова С. Е. (см. Бакулин А. В.) ... 6 796
- Куницына Е. И. (см. Коплак О. В.) ... 2 214
- Курапцев А. С. (см. Баранцев К. А.) .. 2 162
- Курбанова Д. Р., Рамазанов М. К., Магомедов М. А., Муртазаев А. К. Антиферромагнитная модель Поттса на объемно-центрированной кубической решетке ..... 6 816
- Куринов К. О., Кулешов Д. А., Лагуткина А. А., Стенькин Ю. В., Щеголев О. Б. Выделение сигналов от тепловых нейтронов в электронно-нейтронных детекторах с использованием сверточных нейронных сетей в эксперименте ENDA 4 524
- Куценко В. А., Соколов Д. Д., Яровая Е. Б. Неустойчивости в случайных средах и режимы с обострением ..... 4 561
- Кучинский Э. З., Кулеева Н. А., Садовский М. В., Хомский Д. И. Эффект Холла в допированном мотт-халлардовском диэлектрике ..... 3 417
- Л**
- Л. Н. Безматерных** (см. Мошкина Е. М.) ..... 1 24
- Лагуткина А. А. (см. Куринов К. О.) . 4 524
- Лазарев В. В., Гейвандов А. Р., Палто С. П. Спектральные особенности фотоэлектрического эффекта в смесевой донорно-акцепторной композиции фталоцианина цинка и фуллерена  $ZnPc : C_{70}$  . 2 153
- Латош Б. Н. Распад скалярона в пертурбативной квантовой гравитации ..... 5 628
- Лебедев В. В. (см. Колоколов И. В.) .. 6 881
- Левашов П. Р. (см. Мочалов М. А.) .... 3 439
- Левченко А. А., Межов-Деглин Л. П., Пельменёв А. А. Вихри на свободной поверхности слоя нормального гелия He-I в широкой ячейке ..... 4 545
- Литвинов А. Н. (см. Баранцев К. А.) .. 2 162
- Лиховид Н. А. (см. Абдиганиева С. Б.) 5 641
- Лихутов М. И. (см. Мочалов М. А.) .... 3 439
- Лобашев Е. А., Антропов А. С., Стегайлов В. В. Образование, диффузия и рост газонаполненных пузырьков в  $\gamma$ -уране при избытке междоузельных атомов: связь молекулярной динамики и кинетики ..... 2 201
- Логвинов А. И. (см. **Жерноклетов М. В.**) 2 260
- Логунов М. В. (см. Мамонов Е. А.) .... 1 41
- М**
- Магадеев Е. Б., Вахитов Р. М., Канбеков Р. Р. Особенности формирования плоских неоднородных структур в наноразмерных магнитных пленках ..... 1 78
- Магницкая М. В. (см. Боков А. В.) ... 3 350
- Магомедов М. А. (см. Курбанова Д. Р.) 6 816

Майдыковский А. И. (см. Мамонов Е. А.) .....	1	41	Митрофанов А. В., Рожко М. В., Назаров М. М., Серебрянников Е. Е., Федотов А. Б., Сидоров-Бирюков Д. А. Генерация высоких оптических гармоник при взаимодействии фемтосекундных лазерных импульсов среднего ИК-диапазона с поверхностью твердотельных мишеней .....	4	488
Макарова Т. П., Шикин А. М., Ерыженков А. В., Тарасов А. В. Влияние структурных параметров на особенности электронной структуры топологических поверхностных состояний $MnBi_2Te_4$ .....	5	708	Молокеев М. С. (см. Мошкина Е. М.) .	1	24
Максимкин И. П. (см. Мочалов М. А.)	3	439	Моргунов Р. Б. (см. Кошляк О. В.) ....	2	214
Мамонов Е. А., Новиков В. Б., Майдыковский А. И., Темиряева М. П., Темиряев А. Г., Федорова А. А., Логунов М. В., Никитов С. А., Мурзина Т. В. Магнитно-силовая и нелинейно-оптическая микроскопия приповерхностной доменной структуры эпитаксиальной пленки феррита-граната .....	1	41	Морозов И. В. (см. Голубков М. В.) ...	2	180
Маначкин С. Ф. (см. Жерноклетов М. В.)	2	260	Мостовщикова Е. В., Стерхов Е. В., Пыжьянов Я. Я., Титова С. Г. Отклик зарядовой подсистемы на фазовые переходы в двойных манганитах $LnBaMn_2O_6$ .	1	58
Матафонов А. П. (см. Беляев В. С.) ..	3	309	Мочалов М. А., Илькаев Р. И., Фортон В. Е., Ерунов С. В., Аришин 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. Квазиизэнтропическое сжатие неидеальной плазмы гелия при постоянной конечной температуре 21000 К при давлениях ДО 600 ГПа .....	3	439
Мейерович Б. Э. Черная дыра и темная материя в синхронной системе координат	5	660			
Межов-Деглин Л. П. (см. Левченко А. А.) .....	4	545			
Мельников Н. Б., Гуленко А. С., Резер Б. И. Критические явления в динамической теории спиновых флуктуаций	1	35			
Минаков Д. В. (см. Мочалов М. А.) ....	3	439			
Миньков К. Н. (см. Ружицкая Д. Д.) .	6	786			
Мионов В. Л. (см. Татарский Д. А.) .	3	366			

- Мошкина Е. М., Бельская Н. А., Молокеев М. С., Бовина А. Ф., Шабанова К. А., Кох Д., Сереткин Ю. В., Великанов Д. А., Еремин Е. В., Крылов А. С., **Л. Н. Безматерных** Сравнение условий роста, структурных и магнитных свойств оксидов  $\text{Cu}_2\text{MBO}_5$  ( $M = \text{Cr, Fe, Mn}$ ) со структурой людвига ..... 1 24
- Муратов А. В. (см. Случанко Н. Е.) ... 2 172
- Мурзина Т. В. (см. Мамонов Е. А.) .... 1 41
- Муртазаев А. К. (см. Курбанова Д. Р.) 6 816
- Мусихин А. Ю. (см. Зубарев А. Ю.) .. 4 602
- Н**
- Назаров М. М. (см. Митрофанов А. В.) 4 488
- Налетова В. А. (см. Шарова О. А.) .... 1 14
- Никитов С. А. (см. Мамонов Е. А.) .... 1 41
- Ниценко В. И., Соколов А. В., Белик А. А., Глазкова Я. С., Пресняков И. А. Электрическая поляризация в двойном манганите  $\text{ViMn}_7\text{O}_{12}$ : мессбауэровское исследование на зондовых ядрах  $^{57}\text{Fe}$  ..... 5 698
- Новиков В. Б. (см. Мамонов Е. А.) .... 1 41
- Новиков М. Г. (см. **Жерноклетов М. В.**) 2 274
- Новиков М. Г. (см. Мочалов М. А.) .... 3 439
- О**
- Огородников В. А. (см. Мочалов М. А.) 3 439
- П**
- Палто С. П. (см. Лазарев В. В.) ..... 2 153
- Панов К. Н. (см. **Жерноклетов М. В.**) 2 260
- Пантуев В. С. (см. Абдиганиева С. Б.) 5 641
- Парамонов М. А. (см. Мочалов М. А.) . 3 439
- Пашенькин И. Ю. (см. Караштин Е. А.) 1 5
- Пелевина Д. А. (см. Шарова О. А.) ... 1 14
- Пельменёв А. А. (см. Левченко А. А.) 4 545
- Перевалов Т. В. (см. Исламов Д. Р.) .. 3 392
- Подоляк Е. Р. Об устойчивости аксиально-симметричных состояний в теории Гинзбурга–Ландау ..... 2 189
- Полетаев Г. М., Бебихов Ю. В., Семенов А. С., Ситников А. А. Молекулярно-динамическое исследование влияния ориентации межфазной границы на интенсивность растворения титана в кристаллическом и аморфном алюминии 4 537
- Поливанов П. А., Вишняков О. И., Кисловский В. А., Сидоренко А. А. Исследование влияния скорости набегающего потока на течение, индуцируемое диэлектрическим барьерным разрядом .... 5 717
- Половец С. Е. (см. Случанко Н. Е.) ... 2 172
- Полухин Д. С. (см. Игнатченко В. А.) . 1 50
- Попова М. М., Юдин С. Н., Грызлова Е. В., Киселев М. Д., Грум-Гржимайло А. Н. Аттосекундная интерферометрия при участии дискретных состояний ..... 3 297
- Пресняков И. А. (см. Ниценко В. И.) .. 5 698
- Пустовойт П. М. (см. Григорьев С. В.) 3 428
- Пшеничный К. А. (см. Григорьев С. В.) 3 428
- Пыжьязов Я. Я. (см. Мостовщикова Е. В.) ..... 1 58

## Р

<b>Радушнов Д. И., Соловьева А. Ю., Елфимова Е. А.</b> Влияние условий полимеризации на магнитные свойства феррокомпозита .....	1	87
<b>Раевский В. А.</b> (см. <b>Жерноклетов М. В.</b> )	2	260
<b>Рамазанов М. К.</b> (см. Курбанова Д. Р.)	6	816
<b>Резер Б. И.</b> (см. Мельников Н. Б.)	1	35
<b>Родин М. М., Филиппов А. В.</b> Взаимодействие двух заряженных диэлектрических шаров с точечным зарядом .....	3	321
<b>Рожко М. В.</b> (см. Митрофанов А. В.)	4	488
<b>Ружицкая Д. Д., Воробьев К. А., Бульгин Ф. В., Кузин А. Ю., Миньков К. Н.</b> Компактный генератор оптической частотной гребенки на основе лазерного диода с распределенной обратной связью и высокочастотного оптического микрорезонатора .....	6	786
<b>Рыжков А. В.</b> (см. <b>Жерноклетов М. В.</b> )	2	260
<b>Рыжков А. В.</b> (см. Мочалов М. А.)	3	439

## С

<b>Савин А. В., Савина О. И.</b> Акустические солитоны в геликоидах и спиральных нанолентах графена .....	6	806
<b>Савина О. И.</b> (см. Савин А. В.)	6	806
<b>Садаков А. В.</b> (см. Голубков М. В.)	2	180
<b>Садовников А. В.</b> (см. Грачев А. А.)	1	72
<b>Садовников А. В.</b> (см. Губанова Ю. А.)	1	125
<b>Садовский М. В.</b> (см. Кучинский Э. З.)	3	417

<b>Сазонов С. В.</b> Генерация продольного ультразвука импульсами сдвиговой деформации в режиме спин-фононного эха	3	335
<b>Саламатин Д. А.</b> (см. Боков А. В.)	3	350
<b>Сапожников М. В.</b> (см. Караштин Е. А.)	1	5
<b>Сарычев М. Н., Жевстовских И. В., Коростелин Ю. В., Суриков В. Т., Аверкиев Н. С., Гудков В. В.</b> Магнитоупругость ян-теллеровской подсистемы в кристаллах типа $A^{II}B^{VI}$ , допированных хромом .....	1	96
<b>Семенов А. С.</b> (см. Полетаев Г. М.)	4	537
<b>Серебрянников Е. Е.</b> (см. Митрофанов А. В.)	4	488
<b>Серенкова А. Ю., Соколов Д. Д., Юшков Е. В.</b> Нелинейный параметрический резонанс в простейшей модели солнечного динамо .....	4	514
<b>Сереткин Ю. В.</b> (см. Мошкина Е. М.)	1	24
<b>Сидоренко А. А.</b> (см. Поливанов П. А.)	5	717
<b>Сидоров-Бирюков Д. А.</b> (см. Митрофанов А. В.)	4	488
<b>Ситников А. А.</b> (см. Полетаев Г. М.)	4	537
<b>Случанко Н. Е., Жукова Е. С., Алябьева Л. Н., Горшунов Б. П., Муратов А. В., Алещенко Ю. А., Азаревич А. Н., Анисимов М. А., Шицевалова Н. Ю., Половец С. Е., Филипов В. Б.</b> Коллективные и квазилокальные моды в оптических спектрах гексаборидов $YbV_6$ и $YbV_6$ с ян-теллеровской структурной неустойчивостью .....	2	172

- Смирнов А. М. (см. Гаврилов С. Ю.) .. 5 621
- Смирнов Б. М. Генерация электрического поля в пылевой плазме ..... 6 873
- Соболев А. В. (см. Ниценко В. И.) ..... 5 698
- Согомонян К. Л. (см. Шарова О. А.) .. 1 14
- Соколов Д. Д. (см. Куценко В. А.) .... 4 561
- Соколов Д. Д. (см. Серенкова А. Ю.) . 4 514
- Соколов И. М. (см. Баранцев К. А.) ... 2 162
- Соловьева А. Ю. (см. Радужнов Д. И.) 1 87
- Спесивцев Е. В. (см. Исламов Д. Р.) .. 3 392
- Старков А. С., Старков И. А. Зависимость диэлектрической проницаемости и электрокалорического эффекта от размера гранулы сегнетоэлектрической керамики ..... 5 682
- Старков И. А. (см. Старков А. С.) ..... 5 682
- Стегайлов В. В. (см. Лобашев Е. А.) .. 2 201
- Стенькин Ю. В. (см. Куринов К. О.) .. 4 524
- Степанов В. А. (см. Голубков М. В.) .. 2 180
- Стерхов Е. В. (см. Мостовщикова Е. В.) 1 58
- Стрелков Н. В., Ведяев А. В. Резонансный метод измерения параметров спин-вентильной структуры ..... 4 597
- Суриков В. Т. (см. Сарычев М. Н.) .... 1 96
- Т**
- Тавров А. В. (см. Юдаев А. В.) ..... 2 131
- Танеев С. Н. Ускорение солнечных космических лучей ударной волной в нижней короне Солнца 7 мая 1978 г. .... 4 503
- Тарасенко В. Ф. (см. Козырев А. В.) .. 2 284
- Тарасов А. В. (см. Макарова Т. П.) .... 5 708
- Татарский Д. А., Миронов В. Л., Фраерман А. А. Синхронизация автоколебаний магнитных вихрей в обменно-связанных ферромагнитных дисках .... 3 366
- Тверьянович А. С. (см. Циок О. Б.) .. 4 585
- Темирязов А. Г. (см. Мамонов Е. А.) .. 1 41
- Темирязова М. П. (см. Мамонов Е. А.) 1 41
- Терехов И. С. (см. Крачков П. А.) ..... 2 227
- Терехов И. С. Индуцированный заряд в дихалькогенидах переходных металлов . 6 842
- Титова С. Г. (см. Мостовщикова Е. В.) 1 58
- Ткаченко Б. И. (см. Жерноклетов М. В.) 2 260
- Тумакова М. М. (см. Колоколов И. В.) 6 881
- У**
- Усольцев А. С. (см. Голубков М. В.) ... 2 180
- Устинов В. В. (см. Ясюлевич И. А.) ... 4 574
- Ф**
- Федорова А. А. (см. Мамонов Е. А.) .. 1 41
- Федотов А. Б. (см. Митрофанов А. В.) 4 488
- Фещенко Р. М. Об интеграле по времени от электромагнитного поля ..... 4 461
- Филипов В. Б. (см. Случанко Н. Е.) ... 2 172
- Филиппов А. В. (см. Родин М. М.) .... 3 321
- Финюшин С. А. (см. Мочалов М. А.) .. 3 439
- Фортов В. Е. (см. Мочалов М. А.) .... 3 439
- Фраерман А. А. (см. Караштин Е. А.) 1 5
- Фраерман А. А. (см. Татарский Д. А.) 3 366
- Фраерман А. А. Нарушение киральной симметрии и неоднородные состояния в деформированных ферромагнетиках .... 6 822

## Х

- Хомский Д. И.** (см. Кучинский Э. З.) ... 3 417  
**Хорошко Д. Б.** (см. Эскандери М. М.) 4 467  
**Хрусталеv В. В.** (см. Жерноклетов М. В.) 2 260

## Ц

- Цвященко А. В.** (см. Боков А. В.) ..... 3 350  
**Цикалов Д. С.** (см. Игнатченко В. А.) .. 1 50  
**Циок О. Б., Бражкин В. В., Бычков Е. В., Тверьянович А. С.** Сжимаемость, металлизация и процессы релаксации в халькогенидном стекле нестехиометрического состава  $g\text{-As}_3\text{Te}_2$  при высоких гидростатических давлениях: сравнение с «классическим» стеклом  $g\text{-As}_2\text{Te}_3$  .... 4 585

## Ч

- Черненко А. В.** (см. Бричкин А. С.) ... 6 852  
**Чудаков Е. А.** (см. Мочалов М. А.) ..... 3 439  
**Чумакова Л. С.** (см. Бакулин А. В.) ... 6 796

## Ш

- Шабанова К. А.** (см. Мошкина Е. М.) . 1 24  
**Шарафуллин И. Ф.** (см. Гареева З. В.) 1 66  
**Шарова О. А., Виноградова А. С., Согомонян К. Л., Пелевина Д. А., Налетова В. А.** Равновесие сферического намагничивающегося тела в капле магнитной жидкости в однородном магнитном поле ..... 1 14  
**Шашкова И. А.** (см. Юдаев А. В.) .... 2 131  
**Шергин А. П.** (см. Зиновьев А. Н.) .... 5 744  
**Шикин А. М.** (см. Макарова Т. П.) .... 5 708

- Шицевалова Н. Ю.** (см. Случанко Н. Е.) ..... 2 172  
**Шнырков О. Д.** (см. Григорьев С. В.) . 3 428  
**Шульга Н. В.** (см. Гареева З. В.) ..... 1 66  
**Шутов А. В.** (см. Жерноклетов М. В.) 2 274

## Щ

- Щеголев О. Б.** (см. Куринов К. О.) ... 4 524

## Э

- Эскандери М. М., Килин С. Я., Хорошко Д. Б.** Энтропия когерентных состояний оптических полей ..... 4 467

## Ю

- Юдаев А. В., Шашкова И. А., Киселев А. В., Комарова А. А., Тавров А. В.** Коррекция волнового фронта для наблюдения экзопланеты на фоне дифракционной окрестности звезды ..... 2 131  
**Юдин С. Н.** (см. Попова М. М.) ..... 3 297  
**Юшков Е. В.** (см. Серенкова А. Ю.) ... 4 514

## Я

- Яровая Е. Б.** (см. Куценко В. А.) ..... 4 561  
**Ясюлевич И. А., Бебенин Н. Г., Устинов В. В.** Инжекция чисто спинового тока в гелимагнетик ..... 4 574  
**Яшина Е. Г.** (см. Григорьев С. В.) ..... 3 428

## D

- Danilović N.** (see Miladinović T. B.) ..... 6 779

**Dolgikh K., Korochkin A., Rubtsov G., Semikoz D., Tkachev I.** Caustic-like Structures in UHECR Flux after Propagation in Turbulent Intergalactic Magnetic Fields ..... 6 792

**G**

**Gul M. Z.** (see Sharif M.) ..... 4 496

**K**

**Korochkin A.** (see Dolgikh K.) ..... 6 792

**M**

**Miladinović T. B., Simić S., Danilović N.** Ionization transition rates in the intermediate regime of the Keldysh parameter for a (0,1)\*LG spiral amplitude modulated laser field ..... 6 779

**R**

**Rubtsov G.** (see Dolgikh K.) ..... 6 792

**S**

**Semikoz D.** (see Dolgikh K.) ..... 6 792

**Sharif M., Gul M. Z.** Noether Symmetries and Some Exact Solutions in  $f(R, T^2)$  Theory ..... 4 496

**Simić S.** (see Miladinović T. B.) ..... 6 779

**T**

**Tkachev I.** (see Dolgikh K.) ..... 6 792

## ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ ТОМА 163 ЗА 2023 г.

	Вып.	Стр.		Вып.	Стр.
EDN: DIFIMA					
<b>1. Атомы, молекулы, оптика</b>					
<b>1.6 Взаимодействие фотонов, электронов, атомов и молекул с конденсированными телами и поверхностями</b>					
Спектральные особенности фотоэлектрического эффекта в смесевой донорно-акцепторной композиции фталоцианина цинка и фуллерена ZnPc : C <sub>70</sub> . <i>Лазарев В. В., Гейвандов А. Р., Палто С. П.</i>	2	153	Аттосекундная интерферометрия при участии дискретных состояний. <i>Попова М. М., Юдин С. Н., Грызлова Е. В., Киселев М. Д., Грум-Гржимайло А. Н.</i>	3	297
Растекание тока в тонких фольгах или плоских токовых слоях. <i>Гаранин С. Ф., Кравец Е. М.</i>	4	480	Пространственная структура плазменных потоков в магнитных полях лазерной плазмы. <i>Беляев В. С., Загреев В. С., Крайнов В. П., Матафонов А. П.</i>	3	309
<b>1.7 Взаимодействие атомов и молекул с электромагнитным полем, квантовая и классическая оптика, физика лазеров, нелинейная оптика</b>			Взаимодействие двух заряженных диэлектрических шаров с точечным зарядом. <i>Родин М. М., Филиппов А. В.</i>	3	321
Коррекция волнового фронта для наблюдения экзопланеты на фоне дифракционной окрестности звезды. <i>Юдаев А. В., Шашкова И. А., Киселев А. В., Комарова А. А., Тавров А. В.</i>	2	131	Об интеграле по времени от электромагнитного поля. <i>Фещенко Р. М.</i>	4	461
Спектральные особенности фотоэлектрического эффекта в смесевой донорно-акцепторной композиции фталоцианина цинка и фуллерена ZnPc : C <sub>70</sub> . <i>Лазарев В. В., Гейвандов А. Р., Палто С. П.</i>	2	153	Энтропия когерентных состояний оптических полей. <i>Эскандери М. М., Киллин С. Я., Хорошко Д. Б.</i>	4	467
Форма спектра и световой сдвиг резонанса когерентного пленения населенностей в ячейках с антирелаксационным покрытием стенок в моделях зеркального и диффузного отражения. <i>Баранцев К. А., Волошин Г. В., Курапцев А. С., Литвинов А. Н., Соколов И. М.</i>	2	162	Нелинейное поглощение и фотолюминесценция нанотетраподов CdTe с наконечниками CdSe при нерезонансном возбуждении экситонов. <i>Гаврилов С. Ю., Смирнов А. М., Козлова М. В., Васильев Р. Б., Днепровский В. С.</i>	5	621
			Эволюция нелинейных волновых импульсов в теории уравнения синус-Гордон. <i>Камчатнов А. М.</i>	5	734
			Образование и распад автоионизационных состояний — основной механизм неупругих потерь при столкновениях атомов кэВ-энергий. <i>Зиновьев А. Н., Бабенко П. Ю., Шергин А. П.</i>	5	744
			Эффекты конечного времени в одинарном и двойном комптоновском рассеянии. <i>Дубрович В. К., Залаялотдинов Т. А.</i>	6	771

Ionization transition rates in the intermediate regime of the Keldysh parameter for a (0,1)*LG spiral amplitude modulated laser field. <i>Miladinović T. B., Simić S., Danilović N.</i> .....	6	779	<b>2.3 Электромагнитные и слабые взаимодействия</b>	
Компактный генератор оптической частотной гребенки на основе лазерного диода с распределенной обратной связью и высокодобротного оптического микрорезонатора. <i>Ружницкая Д. Д., Воробьев К. А., Булыгин Ф. В., Кузин А. Ю., Миньков К. Н.</i> .....	6	786	Калибровка считывающей электроники детектора "Троицк нью-масс" с использованием цифровых фильтров сигналов. <i>Абдиганиева С. Б., Берлев А. И., Бочков М. А., Лиховид Н. А., Пантуев В. С., Задорожный С. В.</i> .....	5 641
<b>1.8 Классическая электродинамика</b>			<b>2.4 Гравитация и астрофизика</b>	
Растекание тока в тонких фольгах или плоских токовых слоях. <i>Гаранин С. Ф., Кравец Е. М.</i> .....	4	480	Коррекция волнового фронта для наблюдения экзопланеты на фоне дифракционной окрестности звезды. <i>Юдаев А. В., Шашкова И. А., Киселев А. В., Комарова А. А., Таиров А. В.</i> .....	2 131
Генерация высоких оптических гармоник при взаимодействии фемтосекундных лазерных импульсов среднего ИК-диапазона с поверхностью твердотельных мишеней. <i>Митрофанов А. В., Рожко М. В., Назаров М. М., Серебрянников Е. Е., Федотов А. Б., Сидоров-Бирюков Д. А.</i> .....	4	488	Noether Symmetries and Some Exact Solutions in $f(R, T^2)$ Theory. <i>Sharif M., Gul M. Z.</i> .....	4 496
<b>2. Ядра, частицы, поля, гравитация и астрофизика</b>			Ускорение солнечных космических лучей ударной волной в нижней короне Солнца 7 мая 1978 г. <i>Танеев С. Н.</i> .....	4 503
<b>2.1 Структура ядер, столкновения и ядерные реакции</b>			Нелинейный параметрический резонанс в простейшей модели солнечного динамо. <i>Серенкова А. Ю., Соколов Д. Д., Юшков Е. В.</i> .....	4 514
Охлаждение струй для тяжелых флейворов в AA- и pp-столкновениях. <i>Захаров Б.Г.</i> .....	5	646	Выделение сигналов от тепловых нейтронов в электронно-нейтронных детекторах с использованием сверточных нейронных сетей в эксперименте ENDA. <i>Куринов К. О., Кулешов Д. А., Лагуткина А. А., Стенькин Ю. В., Щеголев О. Б.</i> .....	4 524
<b>2.2 Физика адронов и КХД</b>			Распад скалярона в пертурбативной квантовой гравитации. <i>Латош Б. Н.</i> .....	5 628
Охлаждение струй для тяжелых флейворов в AA- и pp-столкновениях. <i>Захаров Б.Г.</i> .....	5	646	Черная дыра и темная материя в синхронной системе координат. <i>Мейерович Б. Э.</i> .....	5 660
Эффекты конечного времени в одинарном и двойном комптоновском рассеянии. <i>Дубрович В. К., Залямютдинов Т. А.</i> .....	6	771	Caustic-like Structures in UHECR Flux after Propagation in Turbulent Intergalactic Magnetic Fields. <i>Dolgikh K., Korochkin A., Rubtsov G., Semikoz D., Tkachev I.</i> .....	6 792

### 3. Твердые тела и жидкости

#### 3.1 Рассеяние и поглощение частиц и волн, спектры возбуждения

- Коллективные и квазилокальные моды в оптических спектрах гексаборидов  $\text{Yb}_6$  и  $\text{YbV}_6$  с ян-теллеровской структурной неустойчивостью. *Случанко Н. Е., Жукова Е. С., Алябьева Л. Н., Горшунюв Б. П., Муратов А. В., Алещенко Ю. А., Азаревич А. Н., Анисимов М. А., Шицевалова Н. Ю., Половец С. Е., Филипов В. Б.* 2 172
- Генерация продольного ультразвука импульсами сдвиговой деформации в режиме спин-фононного эха. *Сазонов С. В.* 3 335
- Терагерцевая спектроскопия с временным разрешением (THz-TDS) светодиодных гетероструктур с тремя и пятью квантовыми ямами  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ . *Бурмистров Е. Р., Авакянц Л. П.* 5 669
- Акустические солитоны в геликоидах и спиральных нанолентах графена. *Савин А. В., Савина О. И.* 6 806
- Влияние толщины инкапсулирующих слоев на качество гетероструктур на основе  $\text{MoSe}_2$ . *Бричкин А. С., Гольшиков Г. М., Черненко А. В.* 6 852

#### 3.2 Структура, механические свойства, дефекты, рост кристаллов

- Молекулярно-динамическое исследование влияния ориентации межфазной границы на интенсивность растворения титана в кристаллическом и аморфном алюминии. *Полетаев Г. М., Бебихов Ю. В., Семёнов А. С., Ситников А. А.* 4 537
- Сжимаемость, металлизация и процессы релаксации в халькогенидном стекле нестехиометрического состава  $g\text{-As}_3\text{Te}_2$  при высоких гидростатических давлениях: сравнение с «классическим» стеклом  $g\text{-As}_2\text{Te}_3$ . *Цюок О. Б., Бражский В. В., Бычков Е. В., Тверьянович А. С.* 4 585

- Влияние примесей на адсорбцию кислорода на поверхности  $\text{Ti}_5\text{Si}_3(0001)$ . *Бакуллин А. В., Чумакова Л. С., Кулькова С. Е.* 6 796
- Акустические солитоны в геликоидах и спиральных нанолентах графена. *Савин А. В., Савина О. И.* 6 806

#### 3.3 Тепловые свойства твердых тел и жидкостей

- Квазиизэнтропическое сжатие газобразных гелия и дейтерия в сферических конструкциях при терапаскальных давлениях. *Жерноклетов М. В., Маначкин С. Ф., Давыдов Н. Б., Раевский В. А., Бликов А. О., Панов К. Н., Рыжков А. В., Аринин В. А., Ткаченко Б. И., Логвинов А. И., Дегтярев А. В., Комраков В. А., Давыдов А. И., Анашкин Н. Н., Хрусталев В. В.* 2 260
- Ударно-волновое сжатие азотного флюида в диапазоне давлений 140–250 ГПа. *Жерноклетов М. В., Ковалев А. Е., Новиков М. Г., Грязнов В. К., Иосилевский И. Л., Шутков А. В.* 2 274
- Изучение влияния замещения  $\text{H}_2\text{O}$  на  $\text{T}_2\text{O}$  на динамические свойства, максимум плотности и температуру плавления льда  $\text{I}_h$  в рамках метода решёточной динамики. *Белослудов В. Р., Гец К. В., Жданов Р. К., Божко Ю. Ю., Кавазов Е.* 4 531
- Сжимаемость, металлизация и процессы релаксации в халькогенидном стекле нестехиометрического состава  $g\text{-As}_3\text{Te}_2$  при высоких гидростатических давлениях: сравнение с «классическим» стеклом  $g\text{-As}_2\text{Te}_3$ . *Цюок О. Б., Бражский В. В., Бычков Е. В., Тверьянович А. С.* 4 585
- Влияние примесей на адсорбцию кислорода на поверхности  $\text{Ti}_5\text{Si}_3(0001)$ . *Бакуллин А. В., Чумакова Л. С., Кулькова С. Е.* 6 796

**3.4 Квантовые жидкости и кристаллы**

Влияние примесей на адсорбцию кислорода на поверхности  $Ti_5Si_3(0001)$ . *Бакуллин А. В., Чумакова Л. С., Кулькова С. Е.* ..... 6 796

**3.5 Низкоразмерные системы (структура и т. д.)**

Терагерцевая спектроскопия с временным разрешением (THz-TDS) светодиодных гетероструктур с тремя и пятью квантовыми ямами  $In_xGa_{1-x}N/GaN$ . *Бурмистров Е. Р., Авакянц Л. П.* ..... 5 669

Влияние толщины инкапсулирующих слоев на качество гетероструктур на основе  $MoSe_2$ . *Бричкин А. С., Голышков Г. М., Черненко А. В.* ..... 6 852

**4. Порядок, беспорядок и фазовые переходы в конденсированных средах****4.1 Неоднородные, неупорядоченные и частично разупорядоченные системы**

Образование, диффузия и рост газонаполненных пузырьков в  $\gamma$ -уране при избытке междоузельных атомов: связь молекулярной динамики и кинетики. *Лобашев Е. А., Антропов А. С., Стегайлов В. В.* ..... 2 201

О гальваномагнитных свойствах двумерной модели Рэлея. *Балагуров Б. Я.* ..... 3 387

Неустойчивости в случайных средах и режимы с обострением. *Куценко В. А., Соколов Д. Д., Яровая Е. Б.* ..... 4 561

Сжимаемость, металлизация и процессы релаксации в халькогенидном стекле нестехиометрического состава  $g-As_3Te_2$  при высоких гидростатических давлениях: сравнение с «классическим» стеклом  $g-As_2Te_3$ . *Циок О. Б., Бражский В. В., Бычков Е. В., Тверьянович А. С.* ..... 4 585

**4.2 Магнетизм, пьезо- и сегнетоэлектричество**

Эффект Холла в туннельных магнитных контактах. *Караитин Е. А., Гусев Н. С., Пашенькин И. Ю., Сапожников М. В., Фраерман А. А.* ..... 1 5

Равновесие сферического намагничивающегося тела в капле магнитной жидкости в однородном магнитном поле. *Шарова О. А., Виноградова А. С., Согомонян К. Л., Пелевина Д. А., Налетова В. А.* ..... 1 14

Сравнение условий роста, структурных и магнитных свойств оксидборатов  $Cu_2MBO_5$  ( $M = Cr, Fe, Mn$ ) со структурой людовгита. *Мошкина Е. М., Бельская Н. А., Молокеев М. С., Бовина А. Ф., Шабанова К. А., Кох Д., Сереткин Ю. В., Великанов Д. А., Еремин Е. В., Крылов А. С., Л. Н. Безматерных* ..... 1 24

Критические явления в динамической теории спиновых флуктуаций. *Мельников Н. Б., Гуленко А. С., Резер В. И.* ... 1 35

Магнитно-силовая и нелинейно-оптическая микроскопия приповерхностной доменной структуры эпитаксиальной пленки феррита-граната. *Мамонов Е. А., Новиков В. Б., Майдыковский А. И., Темиряева М. П., Темиряев А. Г., Федорова А. А., Логунов М. В., Никитов С. А., Мурзина Т. В.* ..... 1 41

Высокочастотная восприимчивость ферромагнитного резонанса в тонких пленках со случайными 1D- и 2D-неоднородностями величины магнитной анизотропии. *Игнатченко В. А., Цикалов Д. С., Полухин Д. С.* ..... 1 50

Отклик зарядовой подсистемы на фазовые переходы в двойных манганитах  $LnBaMn_2O_6$ . *Мостовщикова Е. В., Стерхов Е. В., Пыжъянов Я. Я., Титова С. Г.* 1 58

Гистерезис намагниченности и электрической поляризации в магнитных наноструктурах со взаимодействием Дзялошинского–Мория. <i>Гареева З. В., Шульга Н. В., Шарафуллин И. Ф., Дорошенко Р. А., Звездин А. К.</i> ..... 1 66	Взаимодействие комплексов одноионных магнитов $[Er(HL)(L)] \cdot 4CHCl_3 \cdot H_2O$ с ферромагнитными микрочастицами. <i>Коплак О. В., Дворецкая Е. В., Куницына Е. И., Моргунов Р. Б.</i> ..... 2 214
Управляемая лазерным излучением спиноволновая интерференция в нерегулярной магнитной структуре. <i>Грачев А. А., Садовников А. В.</i> ..... 1 72	Критическая точка на кривой магнитных фазовых переходов первого рода. <i>Валиев Э. З.</i> ..... 3 344
Особенности формирования плоских неоднородных структур в наноразмерных магнитных пленках. <i>Магадеев Е. Б., Вахитов Р. М., Канбеков Р. Р.</i> ..... 1 78	Исследование сверхтонких взаимодействий в синтезированных при высоком давлении соединениях $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$ ( $0 \leq x \leq 1$ ) методом Мёссбауэровской спектроскопии. <i>Боков А. В., Магницкая М. В., Саламатин Д. А., Цвященко А. В.</i> ..... 3 350
Влияние условий полимеризации на магнитные свойства феррокомпозита. <i>Радушинов Д. И., Соловьева А. Ю., Елфимова Е. А.</i> ..... 1 87	Динамическая трансформация доменных стенок в киральных ферримангнетиках. <i>Кулагин Н. Е.</i> ..... 3 357
Магнитоупругость ян-теллеровской подсистемы в кристаллах типа $A^{II}B^{VI}$ , допированных хромом. <i>Сарычев М. Н., Жевстовских И. В., Коростелин Ю. В., Суриков В. Т., Авержиев Н. С., Гудков В. В.</i> ..... 1 96	Синхронизация автоколебаний магнитных вихрей в обменно-связанных ферромагнитных дисках. <i>Татарский Д. А., Миرون В. Л., Фраерман А. А.</i> ..... 3 366
Особенности синтеза и магнитная микроструктура тройных упорядоченных сплавов Fe–Al–M (M = Ga, В, Sn, V, Mn). <i>Воронина Е. В., Абдуллин А. Ф., Иванова А. Г., Добышева Л. В., Королёв А. В., Аржников А. К.</i> ..... 1 106	Нелинейная динамика гейзенберговского ферромагнетика на полуоси. <i>Киселев В. В.</i> ..... 3 375
Исследование процессов намагничивания антиферромагнитных наночастиц в сильных импульсных полях (миниобзор). <i>Красиков А. А., Балаев Д. А.</i> ..... 1 115	Инжекция чисто спинового тока в гелимагнетик. <i>Ясюлович И. А., Бебенин Н. Г., Устинов В. В.</i> ..... 4 574
Формирование полос непропускания спиноволнового сигнала в меандровых структурах из ЖИГ. <i>Губанова Ю. А., Губанов В. А., Бегинин Е. Н., Садовников А. В.</i> ..... 1 125	Резонансный метод измерения параметров спинового транспорта в спин-вентильной структуре. <i>Стрелков Н. В., Ведяев А. В.</i> ..... 4 597
Исследование контактов Джозефсона $Pb_{0.6}In_{0.4}/KFe_2As_2$ и $KFe_2As_2/KFe_2As_2$ . Проверка симметрии параметра порядка. <i>Голубков М. В., Степанов В. А., Садаков А. В., Усольцев А. С., Морозов И. В.</i> ..... 2 180	Зависимость диэлектрической проницаемости и электрокалорического эффекта от размера гранулы сегнетоэлектрической керамики. <i>Старков А. С., Старков И. А.</i> ..... 5 682
	Электрическая поляризация в двойном манганите $BiMn_7O_{12}$ : мессбауэровское исследование на зондовых ядрах $^{57}Fe$ . <i>Ниценко В. И., Соболев А. В., Белик А. А., Глазкова Я. С., Пресняков И. А.</i> ..... 5 698

- Антиферромагнитная модель Поттса на объемно-центрированной кубической решетке. Курбанова Д. Р., Рамазанов М. К., Магомедов М. А., Муртазаев А. К. .... 6 816
- Нарушение киральной симметрии и неоднородные состояния в деформированных ферромагнетиках. Фраерман А. А. .... 6 822

#### 4.3 Сверхпроводимость и сверхтекучесть

- Исследование контактов Джозефсона  $Pb_{0.6}In_{0.4}/KFe_2As_2$  и  $KFe_2As_2/KFe_2As_2$ . Проверка симметрии параметра порядка. Голубков М. В., Степанов В. А., Садаков А. В., Усольцев А. С., Морозов И. В. 2 180
- Об устойчивости аксиально-симметричных состояний в теории Гинзбурга–Ландау. Подоляк Е. Р. .... 2 189
- Вихри на свободной поверхности слоя нормального гелия He-I в широкой ячейке. Левченко А. А., Межов-Деглин Л. П., Пельменёв А. А. .... 4 545

#### 4.4 Общие вопросы физики фазовых переходов

- О гальваномагнитных свойствах двумерной модели Рэлея. Балагуров Б. Я. .... 3 387
- Антиферромагнитная модель Поттса на объемно-центрированной кубической решетке. Курбанова Д. Р., Рамазанов М. К., Магомедов М. А., Муртазаев А. К. .... 6 816
- К теории нуклеации ионных солей из водных растворов. Вещунов М. С. .... 6 830

### 5. Электронные свойства твердых тел

#### 5.1 Электронные свойства металлов и диэлектриков

- Механизм поперечного транспорта заряда в тонких пленках гексагонального нитрида бора. Исламов Д. Р., Перевалов Т. В., Гисматуллин А. А., Азаров И. А., Спесивцев Е. В., Гриценко В. А. .... 3 392

- Влияние структурных параметров на особенности электронной структуры топологических поверхностных состояний  $MnBi_2Te_4$ . Макарова Т. П., Шижин А. М., Ерыженков А. В., Тарасов А. В. .... 5 708

#### 5.2 Сильно коррелированные электронные системы

- Коллективные и квазилокальные моды в оптических спектрах гексаборидов  $Yb_6$  и  $YbV_6$  с ян-теллеровской структурной неустойчивостью. Случанко Н. Е., Жукова Е. С., Алябьева Л. Н., Горшунев Б. П., Муратов А. В., Алещенко Ю. А., Азаревич А. Н., Анисимов М. А., Шлицевалова Н. Ю., Половец С. Е., Филипов В. Б. 2 172
- Жидкость Латтинжера с притяжением и одной примесью: точное решение. Афонин В. В. .... 2 238
- Эффект Холла в допированном мотт-халлбардовском диэлектрике. Кучинский Э. З., Кулеева Н. А., Садовский М. В., Хомский Д. И. .... 3 417

#### 5.3 Физика полупроводников

- Спектральные особенности фотоэлектрического эффекта в смесевой донорно-акцепторной композиции фталоцианина цинка и фуллерена  $ZnPc : C_{70}$ . Лазарев В. В., Гейвандов А. Р., Палто С. П. 2 153
- Механизм поперечного транспорта заряда в тонких пленках гексагонального нитрида бора. Исламов Д. Р., Перевалов Т. В., Гисматуллин А. А., Азаров И. А., Спесивцев Е. В., Гриценко В. А. .... 3 392
- Квантовые осцилляции межслойной проводимости в многослойном топологическом изоляторе. Алисултанов З.З., Абдуллаев Г.О., Григорьев П.Д., Демиров Н.А. . 3 401

- Влияние структурных параметров на особенности электронной структуры топологических поверхностных состояний  $MnBi_2Te_4$ . *Макарова Т. П., Шикин А. М., Ерыженков А. В., Тарасов А. В.* ..... 5 708
- Влияние толщины инкапсулирующих слоев на качество гетероструктур на основе  $MoSe_2$ . *Бричкин А. С., Гольшиков Г. М., Черненко А. В.* ..... 6 852
- Дипольная плазменная мода в наноразмерных полупроводниковых квантовых точках типа «ядро-оболочка» с гетеропереходом второго рода. *Ипатов А. Н.* ..... 6 858
- 5.4 Низкоразмерные системы (электронные свойства)**
- Исследование контактов Джозефсона  $Pb_{0.6}In_{0.4}/KFe_2As_2$  и  $KFe_2As_2/KFe_2As_2$ . Проверка симметрии параметра порядка. *Голубков М. В., Степанов В. А., Садаков А. В., Усольцев А. С., Морозов И. В.* 2 180
- К задаче о связанном состоянии электрона и дырки в дихалькогенидах переходных металлов. *Крачков П. А., Терехов И. С.* 2 227
- Жидкость Латтинжера с притяжением и одной примесью: точное решение. *Афонин В. В.* ..... 2 238
- Механизм поперечного транспорта заряда в тонких пленках гексагонального нитрида бора. *Исламов Д. Р., Перевалов Т. В., Гисматуллин А. А., Азаров И. А., Спасивцев Е. В., Гриценко В. А.* ..... 3 392
- Квантовые осцилляции межслойной проводимости в многослойном топологическом изоляторе. *Алисултанов З.З., Абдуллаев Г.О., Григорьев П.Д., Демиров Н.А.* . 3 401
- Эффект Холла в допированном мотт-халбардовском диэлектрике. *Кучинский Э.З., Кулеева Н.А., Садовский М.В., Хомский Д.И.* ..... 3 417
- Индукцированный заряд в дихалькогенидах переходных металлов. *Терехов И. С.* .... 6 842
- Влияние толщины инкапсулирующих слоев на качество гетероструктур на основе  $MoSe_2$ . *Бричкин А. С., Гольшиков Г. М., Черненко А. В.* ..... 6 852
- Дипольная плазменная мода в наноразмерных полупроводниковых квантовых точках типа «ядро-оболочка» с гетеропереходом второго рода. *Ипатов А. Н.* ..... 6 858
- 6. Статистическая и нелинейная физика, физика «мягкой» материи**
- 6.1 Статистическая физика**
- Модель фрактальной организации хроматина в двумерном пространстве. *Григорьев С. В., Шнырков О. Д., Пшеничный К. А., Пустовойт П. М., Яшина Е. Г.* ..... 3 428
- Неустойчивости в случайных средах и режимы с обострением. *Куценко В. А., Соколов Д. Д., Яровая Е. Б.* ..... 4 561
- 6.2 Полимеры, жидкие кристаллы**
- Влияние условий полимеризации на магнитные свойства феррокомпозита. *Радушинов Д. И., Соловьева А. Ю., Елфимова Е. А.* ..... 1 87
- 6.3 Физика биологических систем**
- Модель фрактальной организации хроматина в двумерном пространстве. *Григорьев С. В., Шнырков О. Д., Пшеничный К. А., Пустовойт П. М., Яшина Е. Г.* ..... 3 428
- 6.5 Динамика жидкостей**
- Вихри на свободной поверхности слоя нормального гелия He-I в широкой ячейке. *Левченко А. А., Межов-Деглин Л. П., Пельменёв А. А.* ..... 4 545

Макроскопические течения, индуцируемые феррожидкостью под действием вращающегося магнитного поля . <i>Зубарев А. Ю., Мусихин А. Ю.</i> . . . . .	4	602
Статистика пассивного скаляра в двумерном сдвиговом течении с флуктуациями. <i>Ивченко Н. А., Вергелес С. С.</i> . . . . .	5	724
Эволюция нелинейных волновых импульсов в теории уравнения синус-Гордон . <i>Камчатнов А. М.</i> . . . . .	5	734
Корреляции завихренности внутри когерентного вихря. <i>Колоколов И. В., Лебедев В. В., Тумакова М. М.</i> . . . . .	6	881

## 6.6 Физика плазмы, термоядерный синтез

Квазиизэнтропическое сжатие газообразных гелия и дейтерия в сферических конструкциях при терапаскальных давлениях. <i>Жерноклетов М. В., Маначкин С. Ф., Давыдов Н. Б., Раевский В. А., Бликов А. О., Панов К. Н., Рыжков А. В., Аринин В. А., Ткаченко Б. И., Логвинов А. И., Дегтярев А. В., Комраков В. А., Давыдов А. И., Анашкин Н. Н., Хрусталева В. В.</i> . . . . .	2	260
Ударно-волновое сжатие азотного флюида в диапазоне давлений 140–250 ГПа . <i>Жерноклетов М. В., Ковалев А. Е., Новиков М. Г., Грязнов В. К., Иосилевский И. Л., Шутков А. В.</i> . . . . .	2	274
Эволюция отрицательной короны в режиме ограничения тока разряда: переход от импульсно-периодического режима к стационарному горению. <i>Козырев А. В., Кожевников В. Ю., Тарасенко В. Ф., Бахит Е. Х., Виноградов Н. П.</i> . . . . .	2	284

Квазиизэнтропическое сжатие неидеальной плазмы гелия при постоянной конечной температуре 21000 К при давлениях ДО 600 ГПа . <i>Мочалов М. А., Илькаев Р. И., Фортков 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.</i> . . . . .	3	439
Исследование влияния скорости набегающего потока на течение, индуцируемое диэлектрическим барьерным разрядом. <i>Полливанов П. А., Вишняков О. И., Кисловский В. А., Сидоренко А. А.</i> . . . . .	5	717
Генерация электрического поля в пылевой плазме. <i>Смирнов Б. М.</i> . . . . .	6	873

## 6.8 Общие вопросы физики нелинейных систем

Генерация продольного ультразвука импульсами сдвиговой деформации в режиме спин-фононного эха. <i>Сазонов С. В.</i> . . . . .	3	335
Эволюция нелинейных волновых импульсов в теории уравнения синус-Гордон . <i>Камчатнов А. М.</i> . . . . .	5	734
Корреляции завихренности внутри когерентного вихря. <i>Колоколов И. В., Лебедев В. В., Тумакова М. М.</i> . . . . .	6	881

## Обзоры

Образование и распад автоионизационных состояний — основной механизм неупругих потерь при столкновениях атомов кэВ-энергий. <i>Зиновьев А. Н., Бабенко П. Ю., Шергин А. П.</i> . . . . .	5	744
------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	---	-----

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