

Том 119, Выпуск 5–6

ISSN 0370-274X
Март 2024



Письма
в
ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
и
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ
ФИЗИКИ



2024 г. Том 119 вып. 5, стр. 323–408
2024 г. Том 119 вып. 6, стр. 409–472



НАУКА
— 1727 —

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

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

том 119

Выпуск 5

10 марта 2024

*Журнал издается под руководством
Отделения физических наук РАН*

Главный редактор В. М. Пудалов

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

Зав. редакцией *И. В. Подыниглазова*

Адрес редакции 119334 Москва, ул. Косыгина 2

тел./факс (499)-137-75-89

e-mail letters@kapitza.ras.ru

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

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

Аномальные корреляции космических лучей, пересмотренные с использованием полной по всему небу выборки лацертид

М. А. Куденко¹⁾, С. В. Троицкий

Институт ядерных исследований РАН, 117312 Москва, Россия

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

Поступила в редакцию 5 января 2024 г.

После переработки 15 января 2024 г.

Принята к публикации 18 января 2024 г.

Космические лучи с энергиями выше 10^{19} эВ, наблюдавшиеся в 1999–2004 гг. экспериментом High Resolution Fly's Eye (HiRes) в стереоскопическом режиме, оказались коррелирующими с направлениями на удаленные лацертиды, что указывало на существование нестандартных нейтральных частиц, проходящих космологические расстояния без поглощения. Этот эффект не мог быть проверен более новыми экспериментами из-за их низкого углового разрешения. Было обнаружено, что распределение в небе лацертид, связанных с космическими лучами, отклоняется от изотропного, что может дать ключ к интерпретации наблюдаемой аномалии. Однако в предыдущих исследованиях использовалась выборка лацертид, которая сама по себе была анизотропной, что усложняло интерпретацию. Здесь мы используем недавно составленную изотропную полную выборку лацертид и те же данные HiRes, чтобы подтвердить наличие корреляций и усилить аргументы в пользу согласованности распределения коррелирующих событий на небе с местной крупномасштабной структурой Вселенной. Дальнейшие проверки аномалии ожидают новых точных данных о космических лучах.

DOI: 10.31857/S123456782405001X, EDN: ADIARJ

1. Введение. Два десятилетия назад были обнаружены загадочные корреляции между направлениями прихода космических лучей сверхвысоких энергий, зарегистрированных экспериментом High Resolution Fly's Eye (HiRes), и лацертидами [1]. Лацертиды, составляющие подкласс блазаров, – это активные ядра галактик с направленными в сторону наблюдателя джетами; они расположены на космологических расстояниях. Хотя ускорение космических частиц в них вполне вероятно, заряженные ядра отклоняются космическими магнитными полями, в то время как угловые расстояния между направлениями прихода событий HiRes и этими источниками значительно меньше ожидаемых отклонений. При этом в Стандартной модели физики частиц отсутствуют нейтральные частицы, способные достичь наблюдателя с такого большого расстояния [2]. Это вызвало несомненный интерес к наблюдению, которое потребовало объяснений в терминах “новой физики”.

Подтвержденные в [3], где использовались неопубликованные данные HiRes, с тем же самым предварительным p -числом 2×10^{-4} , соответствующим $p \sim 10^{-3}$ после учета сделанных попыток,

корреляции [1] остаются не проверенными другими экспериментами и не объясненными однозначно. Причина отсутствия проверок заключается в том, что ни один из современных экспериментов не достигает углового разрешения стереоскопического HiRes, где, согласно моделированию Монте-Карло, 68 % событий восстанавливались в пределах 0.55° от истинного направления их прихода, а 95 % – в пределах 1.26° [4]. В новых экспериментах расстояние между детекторами увеличивалось, чтобы покрыть большую эффективную площадь, что ухудшило их угловое разрешение. Единственная попытка проверить результаты [1, 3] была представлена на конференции [5], но не давала однозначных выводов. Действительно, в [6] оценивалось количество событий, необходимое для проверки корреляций [1] различными экспериментами, регистрирующими космические лучи. Для наземной решетки детекторов обсерватории имени Пьера Оже это число составило около 3500, в то время как в исследовании [5] использовалось только 1672 события. Другие трудности, связанные с этой проверкой, обсуждаются, например, в [7, 8].

Такая ситуация вынуждает использовать исходные данные, чтобы получить максимум информации об этих корреляциях. Ключи к интерпретации мо-

¹⁾e-mail: kudenko.ma19@physics.msu.ru

гут быть найдены либо с астрофизической стороны (какие лацертиды связаны с космическими лучами и чем они отличаются от других), либо со стороны космических частиц (какие события связаны с лацертидами, что можно сказать об их типах их первичных частиц или о распределении направлений их прихода).

Астрофизический подход был использован в работе [9], где было установлено, что в корреляциях доминирует определенный класс лацертид, отобранных по их широкополосному (оптика–рентген) спектральному индексу, связанному с их физическими свойствами. Информация о типе первичных частиц коррелирующих событий не может быть получена из открытых данных и не обсуждается в работе [3]. Глобальное распределение направлений прихода изучалось в работе [8], и именно к нему мы возвращаемся в настоящей работе.

Объяснить наблюдаемые корреляции непросто, даже с помощью новой физики. Многообещающую возможность предоставляют аксионоподобные частицы (ALP) с определенными параметрами, которые смешиваются с фотонами во внешнем магнитном поле и распространяются без поглощения на космологические расстояния, см., например, обзоры [10, 11]. Преобразование энергичных фотонов в ALP в магнитном поле галактики источника с последующим обратным преобразованием в фотоны в поле Млечного Пути было предложено для объяснения наблюдений аномальных энергичных гамма-лучей от блазаров, см., например, [12], и недавнего гамма-всплеска GRB 221009A, см. например, [13]. Переходы в галактических магнитных полях подавлены для сверхвысоких энергий, обсуждаемых в данной статье, но возможны в более слабых полях в скоплениях галактик и филаментах крупномасштабной структуры (LSS) Вселенной [7]. Предсказанием этого сценария является кластеризация коррелирующих событий в направлении локальной структуры LSS, которая и была обнаружена в работе [8].

Одной из сложностей поиска анизотропии коррелированных событий является внутренняя анизотропия неполного каталога лацертид [14], использованного в предыдущих исследованиях. Будучи компиляцией всех доступных на тот момент данных, он охватывает различные области неба с неоднородной, не документированной чувствительностью. Помимо земных причин анизотропии (разные поля зрения телескопов), существует значительная галактическая анизотропия, вызванная поглощением вблизи галактической плоскости (объекты в [1] были отобраны по их наблюдаемой звездной величине,

без поправки на поглощение) и трудностью спектральных наблюдений, необходимых для определения природы источника, в этой области неба. В целом эти анизотропии не имеют никакого отношения к LSS и вряд ли могут повлиять на выводы исследования, однако этого нельзя исключить. Например, одним из подозреваемых виновников такого эффекта является случайная почти перпендикулярная ориентация галактической и сверхгалактической плоскостей: из-за этого доля направлений, попадающих в зону избегания, меньше для локального филамента по сравнению с полным полем зрения HiRes.

С целью избежать таких трудно контролируемых погрешностей, мы недавно составили новый каталог оптически ярких блазаров [15] с изотропным покрытием всего неба. В рамках этого проекта была определена выборка подтвержденных лацертид по тем же критериям, которые использовались в [14], более подробно описанным в [16]. Здесь мы используем эту изотропную выборку для проверки связанного с LSS паттерна [8] в распределении лацертид, коррелирующих с космическими лучами, зарегистрированными HiRes. Также мы сделаем некоторые замечания относительно будущих проверок корреляций с новыми данными о космических лучах.

2. Выборки космических лучей и лацертид.

В настоящем исследовании мы используем ту же выборку направлений прихода 271 события, обнаруженного HiRes стерео [17], которая была использована в [1, 8, 9] и, с добавлением неопубликованных событий низких энергий, в [3]. Подробности об этой выборке можно найти в [4, 17], но никакой информации об отдельных событиях, кроме направлений прихода, опубликованных в виде графика в формате Postscript, там не представлено.

Используемая нами выборка лацертид описана в [15]. Она была построена на основе каталогов блазаров всего неба, отобранных с помощью радиоинтерферометрии со сверхдлинными базами (РСДБ) и наблюдений в гамма-диапазоне. Выборка представляет собой комбинацию двух полных выборок, ограниченных по потоку на 8 ГГц по РСДБ и выше 1 ГэВ, соответственно.

Отбор оптически ярких источников, мотивированный критериями, использованными в [1], и не связанный с полнотой изотропной выборки, проводился на основе звездной величины G -диапазона GAIA DR3, скорректированной на галактическое поглощение, $G_{\text{corr}} < 18^m$. В выборку вошло 336 источников, и их распределение по небу удовлетворяет количественным критериям изотропии, описанным в [15].

Для сравнения мы также используем исходную выборку из 156 подтвержденных лацертид, отобранных из каталога [14] по критерию, связанному с их звездной величиной, $V < 18^m$ без поправки на поглощение. Полосы V и G соответствуют одинаковым длинам волн, хотя последняя из них несколько шире.

3. Космические лучи HiRes, коррелирующие с новой выборкой лацертид.

3.1. Корреляции по направлениям. Мы начинаем с повторения оригинального анализа точно таким же образом, как в [1], но с новым каталогом лацертид. Для заданного угла θ подсчитывается количество пар “направление прихода события HiRes – лацертида”, разделенных углом $\leq \theta$. Затем та же процедура повторяется для большого числа смоделированных наборов направлений прихода и определяется p -значение, измеряющее, насколько часто это или большее число пар может наблюдаться случайно. Обратим внимание, что смоделированные направления прихода не изотропны, а следуют экспозиции HiRes стерео; подробности моделирования см. в [1]. Как и в [1], мы рассматриваем $0^\circ \leq \theta \leq 5^\circ$ с шагом 0.1° .

Результаты анализа подсчета пар показаны на рис. 1, где для сравнения также представлены результаты [1]. Мы не пытаемся оценить здесь окончательное p -значение, поскольку обе выборки сильно перекрываются (52 из 156 объектов старой выборки присутствуют в новом каталоге), а корреляции уже были установлены в работах [1, 3]. Вместо этого отметим, что предварительные p -значения для обеих выборок одного порядка, несмотря на различия в каталогах, и что минимумы соответствуют немного разным значениям θ в диапазоне от 68 % CL до 95 % CL углового разрешения HiRes. Хотя для $\theta = 0.8^\circ$, выделенного в [1], в каждом из двух каталогов найдено по 11 пар, эти лацертиды не совсем одинаковы: только 7 из 11 присутствуют в обеих выборках. В то же время фон в новой выборке больше, поскольку она содержит больше объектов, и p -значения соответственно выше. Это может быть связано с корреляциями с LSS: “новые” лацертиды в изотропном каталоге расположены в зонах, недостаточно покрытых в старом, в частности, вокруг галактической плоскости. Но, как мы уже отмечали, галактическая плоскость почти перпендикулярна местному филаменту, поэтому доля коррелированных источников среди этих вновь добавленных источников может быть меньше, чем в [14].

3.2. Выборка по индексу “оптика–рентген”. Для полноты мы также проводим подсчет пар с подвыборкой лацертид, отобранной из изотропной выборки

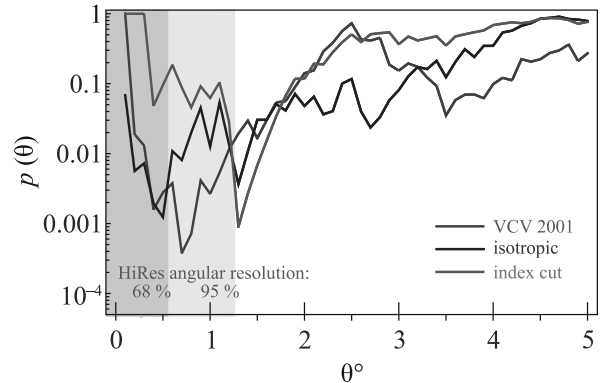


Рис. 1. (Цветной онлайн) Предварительное p -значение случайных ассоциаций космических лучей HiRes stereo с тремя выборками лацертид, как функция угла раствора конуса поиска θ . Красная пунктирная линия соответствует выборке из [14], использованной в [1]; синяя сплошная линия – изотропной выборке [15], использованной здесь; зеленая пунктирная линия – подвыборке, отобранной по спектральному индексу оптика–рентген, см. текст. Закрашенная область соответствует углам раствора, содержащим 68 % (темные) и 95 % (светлые) событий HiRes [4]

по условию $\alpha_{\text{OX}} < 1$, где α_{OX} – спектральный индекс “оптика–рентген”, определенный и исследованный в работе [9]. Таких объектов оказалось 73, и действительно, в согласии с [9], минимальное p -значение для этой выборки ниже, чем для полной. Этот результат также представлен на рис. 1. Заметим, однако, что эта подвыборка не является изотропной из-за сильно неравномерной экспозиции рентгеновских телескопов, в результате чего для многих источников в определенных областях неба рентгеновские потоки неизвестны.

3.3. Распределение коррелирующих направлений на небе. Теперь мы переходим к основной теме настоящего исследования и используем изотропную выборку лацертид для поиска паттерна LSS в распределении коррелирующих направлений прихода космических лучей на небе. Следуя [8], мы используем взвешенную плотность галактик f из трехмерного каталога Two Micron All Sky Survey [18, 19] в качестве шаблона LSS. Детали построения шаблона, выполненного по аналогии с [20, 21], описаны в [8]. Отметим, что все лацертиды расположены далеко за пределами LSS, на расстояниях от ~ 150 Мпк до нескольких гигапарсеков, в то время как типичные расстояния, дающие вклад в шаблон, составляют $\lesssim 30$ Мпк. Корреляции с источниками, расположенными так далеко, оправдывают пренебрежение любым поглощением на ~ 30 Мпк, принятое при расчете f в [8].

На рисунке 2 представлена карта неба с коррелирующими лацертидами, отмеченными на фоне этого шаблонного распределения. Видно, что, как и в работе [9], коррелирующие источники, как правило, попадают в более темные теневые области, соответствующие большим значениям f . Это подтверждается статистическим исследованием с использованием метрики Колмогорова–Смирнова для двух наборов значений f – для коррелирующих лацертид и для всех событий HiRes. Полученная вероятность того, что 19 пар “лацертида–космический луч”, разделенных не более, чем на 95 % CL угловое разрешение, следуют тому же распределению f , что и весь набор данных HiRes, составила 3.9×10^{-3} . Аналогичное значение для выборки, использованной в [1], составляет 2.6×10^{-3} . Таким образом, несмотря на добавление в каталог множества новых источников, паттерн LSS в распределении событий, совпадающих с лацертидами, остается неизменным. Заметим, что это справедливо только для космических лучей, связанных с лацертидами: для всей выборки HiRes корреляции с LSS не обнаружены [22].

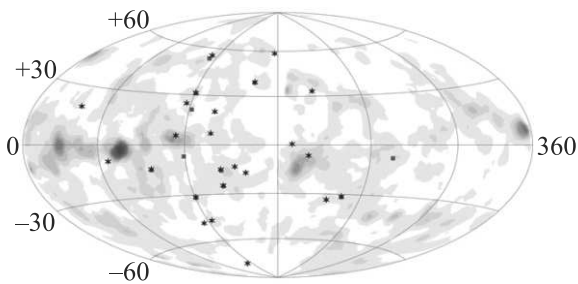


Рис. 2. (Цветной онлайн) Карта неба с положением лацертид, ассоциированных с космическими лучами HiRes (сверхгалактические координаты). Красные квадратики: выборка, использованная в [1], $\theta = 0.8^\circ$. Синие звезды: изотропная выборка, $\theta = 1.3^\circ$. Затенение показывает взвешенную плотность галактик [8]

4. Выводы. Мы использовали недавно составленную изотропную по всему небу выборку из 336 оптически отобранных подтвержденных лацертид для повторного изучения аномальных корреляций космических лучей HiRes стерео с источниками этого класса. Оказалось, что корреляции схожи с первоначально использовавшейся сильно анизотропной выборкой. Формальная значимость эффекта не рассчитывается для нового каталога, поскольку это исследование не является статистически независимым от первоначального. Предварительные p -значения немного выше, чем для выборки, использованной в [1, 3], что хорошо согласуется с нашими ожиданиями, обсуждаемыми выше. Условие для спектрально-

го индекса “оптика–рентген”, $\alpha_{\text{ОХ}} < 1$, предложенное в [9], эффективно отбирает лацертиды, связанные с космическими лучами, в обеих выборках. Главным результатом, для которого важна изотропность выборки, является подтверждение ранее установленной [8] связи с LSS в распределении коррелирующих событий по небу, которая отсутствует для всей выборки космических лучей, но предсказывается объяснением аномалии, связанным с ALP.

Хотя низкое угловое разрешение современных обсерваторий космических лучей не позволяет прямо проверить описанные здесь эффекты с помощью новых данных, большая статистика, собранная этими экспериментами, может помочь частично преодолеть эту трудность. В ближайшем будущем проверка корреляций лацертид с космическими лучами может быть проведена, в частности, с помощью данных, собранных экспериментом Telescope Array [23], который является преемником HiRes. Для точной оценки чувствительности ожидаемого анализа и уточнения грубых оценок, приведенных в работе [6], необходимо специальное моделирование, включающее специфические детали эксперимента. Настоящее исследование позволяет нам сделать несколько замечаний, которые могут быть полезны при планировании стратегии этих проверок.

- Важно повторить тест на подсчет пар с тем же набором лацертид, который использовался для установления корреляций [1], и с той же процедурой.
- Конкретный угол θ , при котором корреляции наиболее значимы, зависит от доли событий, приходящих от лацертид, и от доли лацертид в наборе источников космических лучей. Оба этих числа малы и сильно флуктуируют, поэтому имеет смысл рассмотреть различные значения θ .
- Для проверки корреляции событий с LSS рекомендуется использовать изотропную выборку источников.
- Учитывая, что паттерн LSS был предсказан в сценарии ALP, и что другое предсказание в этом случае состоит в том, что первичными частицами являются фотоны, было бы важно исследовать возможное содержание фотонов в коррелирующих событиях. Однако возможны и другие объяснения, и любая информация о типах первичных частиц в связанных с лацертидами событиях помогла бы сделать выбор между сценариями.

Авторы признательны М. Кузнецову и Г. Рубцову за интересные и полезные обсуждения, а также трем анонимным рецензентам за полезные комментарии.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант 22-12-00253.

Конфликт интересов. Конфликт интересов отсутствует. Авторы получили поддержку от Российского научного фонда.

1. D. S. Gorbunov, P. G. Tinyakov, I. I. Tkachev, and S. V. Troitsky, JETP Lett. **80**, 145 (2004).
2. P. G. Tinyakov and I. I. Tkachev, JETP **106**, 481 (2008).
3. R. U. Abbasi, T. Abu-Zayyad, J. F. Amann et al. (HiRes collaboration), Astrophys. J. **636**, 680 (2006).
4. C. B. Finley, *Anisotropy of arrival directions of ultrahigh energy cosmic rays. PhD thesis*, Columbia U., N.Y. (2006).
5. D. Harari, in 30th International Cosmic Ray Conference **4**, 283 (2008).
6. D. S. Gorbunov, P. G. Tinyakov, I. I. Tkachev, and S. V. Troitsky, JCAP **01**, 025 (2006).
7. M. Fairbairn, T. Rashba, and S. V. Troitsky, Phys. Rev. D **84**, 125019 (2011).
8. S. Troitsky, Eur. Phys. J. C **81**, 264 (2021).
9. S. V. Troitsky, Mon. Not. Roy. Astron. Soc. **388**, L79 (2008).
10. S. V. Troitsky, JETP Lett. **105**, 55 (2017).
11. G. Galanti and M. Roncadelli, Universe **8**, 253 (2022).
12. M. Simet, D. Hooper, and P. D. Serpico, Phys. Rev. D **77**, 063001 (2008).
13. S. V. Troitsky, Pis'ma v ZhETF **116**, 745 (2022).
14. M. P. Véron-Cetty and P. Véron, Astron. Astrophys. **374**, 92 (2001).
15. M. Kudenko and S. Troitsky, arXiv:2312.07508 (2023).
16. M. P. Veron-Cetty and P. Veron, Astron. Astrophys. Suppl. Ser. **100**, 521 (1993).
17. R. U. Abbasi, T. Abu-Zayyad, J. F. Amann et al. (HiRes collaboration), Astrophys. J. Lett. **610**, L73 (2004).
18. J. P. Huchra, L. M. Macri, K. L. Masters et al. (2MASS), Astrophys. J. Suppl. **199**, 26 (2012).
19. L. Macri, R. Kraan-Korteweg, and T. Lambert et al. (2MASS), Astrophys. J. Suppl. **245**, 6 (2019).
20. H. B. J. Koers and P. Tinyakov, JCAP **04**, 003 (2009).
21. H. B. J. Koers and P. Tinyakov, Mon. Not. Roy. Astron. Soc. **399**, 1005 (2009).
22. R. U. Abbasi, T. Abu-Zayyad, M. Allen et al. (HiRes collaboration), Astrophys. J. Lett. **713**, L64 (2010).
23. H. Kawai, S. Yoshida, H. Yoshii et al. (Telescope Array collaboration), Nucl. Phys. B Proc. Suppl. **175–176**, 221 (2008).

Возмущения в теории Хорндески над анизотропным космологическим фоном¹⁾

С. А. Миронов^{+*×2)}, А. М. Штенникова^{+°2)}

⁺Институт ядерных исследований РАН, 117312 Москва, Россия

^{*}Институт теоретической и математической физики, МГУ имени М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

[×]НИЦ “Курчатовский институт”, 123182 Москва, Россия

[°]Кафедра физики частиц и космологии, физический факультет, МГУ имени М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 1 июля 2023 г.

После переработки 27 января 2024 г.

Принята к публикации 28 января 2024 г.

Рассмотрение анизотропного космологического фона является интересной и одновременно сложной задачей теоретической физики, поскольку мы не только предполагаем высокую степень анизотропии на ранних стадиях развития Вселенной, но и наблюдаем ее в малой степени до сих пор. В этой работе мы построили действие для возмущений над фоном типа Бианки I в наиболее общей скалярно-тензорной теории гравитации, теории Хорндески, и оценили влияние отклонения от анизотропного фона на ранее установленное устойчивое решение, полученное в предыдущих работах.

DOI: 10.31857/S1234567824050021, EDN: BMTZMQ

1. Вступление. Теория Хорндески [1–4] (см. [5] для обзора) является наиболее общей скалярно-тензорной теорией гравитации со вторыми производными в уравнениях движения, что делает ее интересной в плане построения новых моделей темной материи, темной энергии, червоточин и так далее. Однако построение устойчивых решений теории ограничено так называемой по-го теоремой [6, 7]. Она была сформулирована для случая однородного и изотропного космологического фона а также сферически симметричного фона. Широко рассматривались также варианты ее обхода [7–21].

Однако, список задач, рассматриваемых в контексте теории Хорндески, этим не исчерпывается, и существуют работы, посвященные изучению анизотропного фона [22, 23]. С космологической точки зрения принято считать, что на ранних этапах инфляции Вселенная была в высокой степени анизотропна [24–26], кроме того, даже сейчас, согласно наблюдениям, некоторая степень анизотропии присутствует при измерении микроволнового фона. В связи с этим, становится актуальным изучение и построение потенциально несингулярных решений в случае анизотропного фона.

В ранее рассмотренных моделях имеет место по-го теорема, которая запрещает устойчивые решения в общей теории Хорндески на всей временной оси. Однако теорема сформулирована для изотропного фона, поэтому возникает вопрос, не является ли существование этой теоремы следствием высокой симметрии пространства-времени. Этот вопрос требует дальнейшего изучения. С другой стороны, авторы статьи рассмотрели способ обойти по-го теорему в изотропном случае [21]. Дело в том, что мы рассматриваем лагранжиан с особым соотношением между функциями, таким, что единственная скалярная степень свободы является нединамической над однородным изотропным фоном, и по-го теорема неприменима. Ранее для этой ситуации были построены устойчивые решения типа Вселенной с отскоком и Генезиса. В данной работе мы показываем, что этот способ больше не может быть использован, и решение на самом деле неустойчиво. Это становится очевидным, если ввести в существующее решение небольшую анизотропию. Полученный результат очень важен, так как показывает, что попытка избавиться от одной из степеней свободы системы на определенном фоне иногда приводит к патологии близких решений.

В данной работе мы рассматриваем возмущения метрики и скалярного поля над однородным, но анизотропным фоном типа Бианки I. Затем интегрируем нединамические переменные в частично

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

²⁾e-mail: sa.mironov_1@physics.msu.ru; shtennikova@inr.ru

калибровочно-инвариантной форме, разрешаем связи и получаем действие для возмущений. Мы также показываем, как квадратичное действие сводится к изотропному случаю фридмановской вселенной, и проверяем, как отклонение от изотропного фона влияет на ранее полученное [21] стабильное решение.

2. Возмущения над анизотропным фоном.

Мы рассматриваем теорию Хорндески со следующим действием:

$$S = \int d^4x \sqrt{-g} (\mathcal{L}_2 + \mathcal{L}_3 + \mathcal{L}_4),$$

$$\mathcal{L}_2 = F(\pi, X), \quad (1a)$$

$$\mathcal{L}_3 = K(\pi, X) \square \pi, \quad (1b)$$

$$\mathcal{L}_4 = -G_4(\pi, X)R + 2G_{4X}(\pi, X) \left[(\square \pi)^2 - \pi_{;\mu\nu} \pi^{;\mu\nu} \right], \quad (1c)$$

где π – скалярное поле, $X = g^{\mu\nu} \pi_{;\mu} \pi_{;\nu}$, $\pi_{;\mu} = \partial_\mu \pi$, $\pi_{;\mu\nu} = \nabla_\nu \nabla_\mu \pi$, $\square \pi = g^{\mu\nu} \nabla_\nu \nabla_\mu \pi$, $G_{4X} = \partial G_4 / \partial X$, и т.д.

В данной работе мы рассматриваем анизотропный фон следующего вида:

$$ds^2 = dt^2 - (a^2(t)dx^2 + b^2(t)dy^2 + c^2(t)dz^2). \quad (2)$$

Разложение возмущений метрики $h_{\mu\nu}$ по спирально-остям в этом случае будет следующим:

$$h_{00} = 2\Phi \quad (3a)$$

$$h_{0i} = -\partial_i \beta + Z_i^T, \quad (3b)$$

$$h_{ij} = -2\frac{H_i}{H} \Psi g_{ij} - 2\partial_i \partial_j E - (\partial_i W_j^T + \partial_j W_i^T) + h_{ij}^{TT}, \quad (3c)$$

где Φ, β, Ψ, E – скалярные поля, H_i – параметры Хаббла, отвечающие соответствующим направлениям (здесь и далее $i = a, b, c$) и $H = \frac{1}{3}(H_a + H_b + H_c)$, Z_i^T, W_i^T – поперечные векторные поля, $(\partial_i Z_i^T = \partial_i W_i^T = 0)$, h_{ij}^{TT} – поперечный бесследовый тензор. Также мы обозначаем за χ возмущение скалярного поля π .

Действие для тензорного сектора возмущений имеет следующую форму:

$$S_h^{(2)} = \int dt d^3x a^3 \times \left[\frac{A_5}{2} (\dot{h}_{ij})^2 - A_2 (\Delta_a^2 h_{ij}^{TT} + \Delta_b^2 h_{ij}^{TT} + \Delta_c^2 h_{ij}^{TT}) \right]. \quad (4)$$

Здесь точка означает производную по космологическому времени t , $\Delta_a = a^{-1} \partial_x$, $\Delta_b = b^{-1} \partial_y$, $\Delta_c = c^{-1} \partial_z$, коэффициенты A_i являются комбинациями функций лагранжиана и их производных.

Аналогично изотропному случаю, векторные возмущения оказываются нединамичными, а скалярные – самыми нетривиальными в разрешении связей. Без потери общности мы частично воспользуемся калибровочной свободой и с самого начала зафиксируем $\partial_i \partial_j E = 0$. Тогда действие второго порядка для скалярного сектора возмущений принимает вид:

$$\begin{aligned} S^{(2)} = \int dx abc & \left(\frac{1}{6} A_1 \sum_{i \neq j} \dot{\Psi}_i \dot{\Psi}_j + \right. \\ & + \frac{A_2}{2} \sum_{\substack{i=a,b,c \\ i \neq j \neq k}} \Delta_i \Psi_j \Delta_i \Psi_k + A_3 \Phi^2 + \\ & + \Phi (A_4^i \Delta_i^2 \beta) + A_5 \sum_{\substack{i=a,b,c \\ i \neq j \neq k}} \dot{\Psi}_i (\Delta_j^2 \beta + \Delta_k^2 \beta) + \\ & + \Phi (A_6^i \dot{\Psi}_i) + \frac{A_7}{2} \Phi \sum_{\substack{i=a,b,c \\ i \neq j \neq k}} \Delta_i^2 (\Psi_j + \Psi_k) + \\ & + \Phi (A_8^i \Delta_i^2 \chi) + \dot{\chi} (A_9^i \Delta_i^2 \beta) + \chi (A_{10}^i \ddot{\Psi}_i) + \\ & + A_{11} \Phi \dot{\chi} + \chi (A_{12}^i \Delta_i^2 \beta) + \\ & + \chi \sum_{i,j} \frac{1}{2} A_{13}^{ij} (\Delta_i^2 \Psi_j + \Delta_j^2 \Psi_i) + A_{14} (\dot{\chi})^2 + \\ & + A_{15}^i (\Delta_i \chi)^2 + A_{17} \Phi \chi + \chi (A_{18}^i \dot{\Psi}_i) + \\ & + A_{20} \chi^2 + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=a,b,c \\ i \neq j}} B^{ij} \Psi_i \dot{\Psi}_j - \\ & - \Psi_a (B^{ab} \Delta_y^2 \beta + B^{ac} \Delta_z^2 \beta) + \\ & + \Psi_b (B^{ab} \Delta_x^2 \beta + B^{bc} \Delta_z^2 \beta) + \\ & \left. + \Psi_c (B^{ac} \Delta_x^2 \beta - B^{bc} \Delta_y^2 \beta) \right). \quad (5) \end{aligned}$$

Здесь $\Psi_i = \bar{H}_i \Psi$ и $\bar{H}_i = H_i/H$, кроме того, мы подразумеваем суммирование по повторяющимся индексам. Явная форма коэффициентов может быть найдена в дополнительных материалах – Appendix A³⁾. Выбор обозначения A_i сделан для явного соответствия между изотропным и анизотропным случаями; коэффициенты B_i отвечают слагаемым, которых не было в изотропном случае. Переменные Ψ_i вводятся для удобства и упрощения записи.

3. Введение калибровочно-инвариантных величин. В этом разделе мы сведем действие (5) к одной переменной, используя калибровочно-инвариантные поля.

³⁾Отметим, что все коэффициенты перед пространственными производными (кроме A_1 и A_2) претерпевают “расщепление”. Это является прямым следствием анизотропии фоновой метрики. Коэффициенты A_1 и A_2 так же “расщепятся”, но только после добавления члена $\mathcal{L}_5$ в общую теорию Хорндески.

Поскольку мы в самом начале частично зафиксировали калибровку, выбрав $\partial_i \partial_j E = 0$, действие (5) инвариантно относительно остаточных калибровочных преобразований:

$$\begin{aligned}\Phi &\rightarrow \Phi + \dot{\xi}_0, & \beta &\rightarrow \beta - \xi_0, \\ \chi &\rightarrow \chi + \xi_0 \dot{\pi}, & \Psi &\rightarrow \Psi + \xi_0 H.\end{aligned}\quad (6)$$

Основываясь на этом, мы вводим новые калибровочно-инвариантные переменные:

$$\mathcal{X} = \chi + \dot{\pi}\beta, \quad (7a)$$

$$\mathcal{Y}_i = \Psi_i + H_i \beta, \quad (7b)$$

$$\mathcal{Z} = \Phi + \dot{\beta}. \quad (7c)$$

И в терминах этих переменных действие принимает следующий вид:

$$\begin{aligned}S^{(2)} = & \int dx \, abc \left(\frac{1}{6} A_1 \sum_{i \neq j} \dot{\mathcal{Y}}_i \dot{\mathcal{Y}}_j + \right. \\ & + \frac{A_2}{2} \sum_{\substack{i=a,b,c \\ i \neq j \neq k}} \Delta_i \mathcal{Y}_j \Delta_i \mathcal{Y}_k + A_3 \mathcal{Z}^2 + \mathcal{Z} (A_6^i \dot{\mathcal{Y}}_i) + \\ & + \frac{A_7}{2} \mathcal{Z} \sum_{\substack{i=a,b,c \\ i \neq j \neq k}} \Delta_i^2 (\mathcal{Y}_j + \mathcal{Y}_k) + \mathcal{Z} (A_8^i \Delta_i^2 \mathcal{X}) + \\ & + \mathcal{X} (A_{10}^i \ddot{\mathcal{Y}}_i) + A_{11} \mathcal{Z} \dot{\mathcal{X}} + \mathcal{X} \sum_{i,j} \frac{1}{2} A_{13}^{ij} (\Delta_i^2 \mathcal{Y}_j + \Delta_j^2 \mathcal{Y}_i) + \\ & + A_{14} (\dot{\mathcal{X}})^2 + (A_{15}^i (\Delta_i \mathcal{X})^2) + A_{17} \mathcal{X} \mathcal{Z} + \mathcal{X} (A_{18}^i \dot{\mathcal{Y}}_i) + \\ & \left. + A_{20} \mathcal{X}^2 + C_3^{ab} \mathcal{Y}_a \dot{\mathcal{Y}}_b + C_3^{bc} \mathcal{Y}_c \dot{\mathcal{Y}}_b + C_3^{ac} \mathcal{Y}_a \dot{\mathcal{Y}}_c \right). \quad (8)\end{aligned}$$

Поле $\mathcal{Z}$, очевидно, является нединамическим, и, проварьировав по нему действие, мы получаем следующую связь:

$$\begin{aligned}\mathcal{Z} = & -\frac{1}{2} \frac{1}{A_3} \left((A_8^i \Delta_i^2 \mathcal{X}) + A_6^i \dot{\mathcal{Y}}_i + \right. \\ & \left. + A_{11} \dot{\mathcal{X}} \frac{A_7}{2} \sum_{\substack{i=a,b,c \\ i \neq j \neq k}} \Delta_i^2 (\mathcal{Y}_j + \mathcal{Y}_k) + \mathcal{X} A_{17} \right). \quad (9)\end{aligned}$$

Затем мы подставляем $\mathcal{Y}_i = \bar{H}_i \mathcal{U}$ и вводим новое поле ζ как следующую линейную комбинацию:

$$\zeta = \mathcal{U} + \eta \mathcal{X}, \quad \text{где} \quad (10)$$

$$\eta = 9 \frac{A_{11} A_4 + 2 A_3 A_8}{(4 (\bar{H}_a \bar{H}_b + \bar{H}_a \bar{H}_c + \bar{H}_b \bar{H}_c) A_1 A_3 - 27 A_4^2)},$$

здесь и далее

$$A_4 = \frac{1}{3} \sum_{l=a,b,c} A_4^l \bar{H}_l, \quad A_8 = \frac{1}{3} \sum_{l=a,b,c} A_8^l \bar{H}_l. \quad (11)$$

Поле ζ выделяется как единственная динамическая переменная, $\mathcal{X}$ при этом становится связью. Это не единственный способ введения динамической переменной, мы также можем сделать нединамическим $\mathcal{U}$. Физически результат, конечно, не зависит от выбора переменных, но вид действия может измениться.

Таким образом, в терминах ζ и $\mathcal{X}$ действие принимает вид:

$$\begin{aligned}S^{(2)} = & \int dx \, abc \left((\dot{\zeta})^2 \times \right. \\ & \times \left(\frac{2}{3} A_1 (\bar{H}_a \bar{H}_b + \bar{H}_a \bar{H}_c + \bar{H}_b \bar{H}_c) - \frac{9}{2} \frac{A_4^2}{A_3} \right) - \\ & - \zeta \mathcal{X} C_3 - \frac{1}{2 A_3} (\mathcal{X} C_1 - \zeta C_2)^2 + \\ & \left. + M \mathcal{X}^2 + \zeta^2 (m + C_4) + \mathcal{X} \zeta C_5 \right), \quad (12)\end{aligned}$$

где

$$C_1 = \Sigma_a \frac{k_x^2}{a^2} + \Sigma_b \frac{k_y^2}{b^2} + \Sigma_c \frac{k_z^2}{c^2}, \quad (13a)$$

$$C_2 = \Theta_a \frac{k_x^2}{a^2} + \Theta_b \frac{k_y^2}{b^2} + \Theta_c \frac{k_z^2}{c^2}, \quad (13b)$$

$$C_3 = \Lambda_a \frac{k_x^2}{a^2} + \Lambda_b \frac{k_y^2}{b^2} + \Lambda_c \frac{k_z^2}{c^2}, \quad (13c)$$

$$C_4 = \Pi_a \frac{k_x^2}{a^2} + \Pi_b \frac{k_y^2}{b^2} + \Pi_c \frac{k_z^2}{c^2}, \quad (13d)$$

$$C_5 = \Xi_a \frac{k_x^2}{a^2} + \Xi_b \frac{k_y^2}{b^2} + \Xi_c \frac{k_z^2}{c^2}, \quad (13e)$$

где $\Lambda_i, \Xi_i, \Pi_i, \Theta, M, m$ и Σ_i - линейные комбинации коэффициентов A_i , которые могут быть найдены в дополнительных материалах - Appendix B.

Как мы сказали ранее, теперь становится очевидным, что поле $\mathcal{X}$ является нединамическим и соответствующая ему связь будет следующая:

$$\mathcal{X} = \frac{1}{C_1^2 - 2MA_3} \left((C_1 C_2 + A_3 C_5) \zeta - A_3 C_3 \dot{\zeta} \right). \quad (14)$$

После подстановки (14) в (12), мы получаем

$$\begin{aligned}S^{(2)} = & \int dx \, abc \left((\dot{\zeta})^2 \times \right. \\ & \times \left(\frac{2}{3} A_1 (\bar{H}_a \bar{H}_b + \bar{H}_a \bar{H}_c + \bar{H}_b \bar{H}_c) - \right. \\ & - \frac{9}{2} \frac{A_4^2}{A_3} + \frac{1}{2} \frac{A_3 C_3^2}{C_1^2 - 2MA_3} \left. \right) + \\ & + \zeta^2 \left(C_4 + \frac{C_1 C_2 C_5}{C_1^2 - 2MA_3} + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \frac{1}{abc} \left[abc \frac{C_1 C_2 C_3}{C_1^2 - 2MA_3} \right] \right) +\end{aligned}$$

$$+ \zeta^2 \left(m + \frac{1}{2} \frac{A_3 C_5^2 + 2C_2^2 M}{C_1^2 - 2MA_3} + \frac{1}{2} \frac{1}{abc} \frac{d}{dt} \left[\frac{abc A_3 C_3 C_5}{C_1^2 - 2MA_3} \right] \right). \quad (15)$$

В действии (15) первое слагаемое – кинетический член, второе – градиентный (он пропорционален k^2), а третий соответствует массе поля ζ .

4. Изотропный предел. В изотропном случае $b = a, c = a$ коэффициенты C_i , соответственно, принимают вид:

$$C_1 = A_4 \frac{(2A_1 A_{11} + 9A_4 A_8) k^2}{(4A_1 A_3 - 9A_4^2) a^2}, \quad (16a)$$

$$C_2 = \frac{2}{3} A_1 \frac{k^2}{a^2}, \quad (16b)$$

$$C_3 = \frac{9A_4 A_8 + 2A_1 A_{11} k^2}{3A_3 a^2}, \quad (16c)$$

$$C_4 = \left(A_2 + \frac{1}{2} \frac{1}{a} \frac{d}{dt} \left[\frac{A_4 A_1 a}{A_3} \right] \right) \frac{k^2}{a^2}, \quad (16d)$$

$$C_5 = 0, \quad (16e)$$

$$m = M = 0. \quad (16f)$$

А действие (15) сокращается до

$$S^{(2)} = \int dt d^3x a^3 \left(\mathcal{G}_S (\dot{\zeta})^2 - \mathcal{F}_S \frac{(\nabla \zeta)^2}{a^2} \right), \quad (17)$$

где

$$\mathcal{G}_S = \frac{4}{9} \frac{A_3 A_1^2}{A_4^2} - A_1, \quad (18a)$$

$$\mathcal{F}_S = -\frac{1}{a} \frac{d}{dt} \left[\frac{a A_1 A_7}{3 A_4} \right] - A_2 = \frac{1}{a} \frac{d}{dt} \left[\frac{a A_5 \cdot A_7}{2 A_4} \right] - A_2, \quad (18b)$$

что соответствует уже известному результату.

5. Проверка стабильности Вселенной с отскоком относительно малой анизотропии. Для дальнейшего анализа теории, мы рассмотрим действие (5) в унитарной калибровке $\chi = 0$ и вектором момента $\vec{k}$, направленным вдоль оси x , таким образом, что $\vec{k} = (k_x, 0, 0)$. Затем варьируем действие по переменным Φ и β и получаем следующие связи:

$$\Phi = \frac{A_1}{3A_4^x} \left(\dot{\Psi}_b + \dot{\Psi}_c - (H_a - H_b) \Psi_b - (H_a - H_c) \Psi_c \right), \quad (19a)$$

$$k_x^2 \beta = \frac{1}{A_4^x} \left(\left(\dot{\Psi}_i A_4^i \right) - \frac{1}{3} A_1 k_x^2 (\Psi_b + \Psi_c) \right) + \quad (19b)$$

$$+ \frac{2}{3} \frac{A_1 A_3}{(A_4^x)^2} \left((H_a - H_b) \Psi_b + (H_a - H_c) \Psi_c - (\dot{\Psi}_b + \dot{\Psi}_c) \right).$$

После отрезивания связей, мы получаем действие относительно переменной Ψ

$$S^{(2)} = \int dt d^3x abc \left(\mathcal{G}_S (\dot{\Psi})^2 + M \Psi^2 + \mathcal{F}_S \frac{k_x^2}{a^2} \Psi^2 \right), \quad (20)$$

где

$$\mathcal{G}_S = \frac{2}{9} \frac{A_3 A_1^2}{(A_4^x)^2} (\bar{H}_b + \bar{H}_c)^2 - \frac{2}{3} \frac{A_1}{A_4^x} \times \\ \times (A_4^y \bar{H}_b + A_4^z \bar{H}_c) (\bar{H}_b + \bar{H}_c) + \frac{2}{3} A_1 \bar{H}_b \bar{H}_c, \quad (21a)$$

$$\mathcal{F}_S = -2A_2 \bar{H}_b \bar{H}_c - \frac{1}{9a^3} (\bar{H}_b + \bar{H}_c)^2 \frac{d}{dt} \left[\frac{A_1^2 a^3}{A_4^x} \right] + \\ + \frac{A_1^2}{9A_4^x} (\bar{H}_b^2 - \bar{H}_c^2) (H_b - H_c), \quad (21b)$$

явное выражение для коэффициента M нам сейчас не очень важно. Несмотря на то, что мы по новой разрешили связи в унитарной калибровке, скорость звука совпадает с той, которую мы получили из действия (15).

Рассмотрим теперь модель с конкретным лагранжианом

$$\mathcal{L} = \frac{\pi^2 - \tau^2}{3(\tau^2 + \pi^2)^2} - \frac{\pi^2 X}{(\tau^2 + \pi^2)^2} + \frac{\pi X}{3(\tau^2 + \pi^2)} \square \pi + \frac{1}{2} R. \quad (22)$$

Этот лагранжиан был получен в работе [21] и отвечает ситуации, когда в действии (17) $A_4 = 0$. В этой модели существует решение изотропной Вселенной с отскоком, но без динамических скалярных мод возмущений. Проверим теперь стабильность этого решения относительно малых отклонений решения от изотропного, усредненный параметр Хаббла $\bar{H}$ при этом остается неизменным

$$H_a = \frac{t}{(\tau^2 + t^2)} + \frac{\alpha}{(\tau^2 + t^2)^{3/2}}, \\ H_b = \frac{t}{(\tau^2 + t^2)} - \frac{\alpha}{(\tau^2 + t^2)^{3/2}}, \quad (23) \\ H_c = \frac{t}{(\tau^2 + t^2)}.$$

Здесь параметр τ определяет амплитуду отскока, а α – величина отклонения решения от изотропного случая (см. рис. 1).

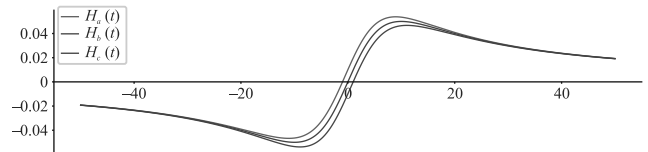


Рис. 1. (Цветной онлайн) Параметры Хаббла $H_a(t), H_b(t), H_c(t)$, при выборе $\alpha = 10, \tau = 10$. Решение с отскоком характеризуется наличием изгиба в начале координат и стремлением к 0 на $\pm\infty$

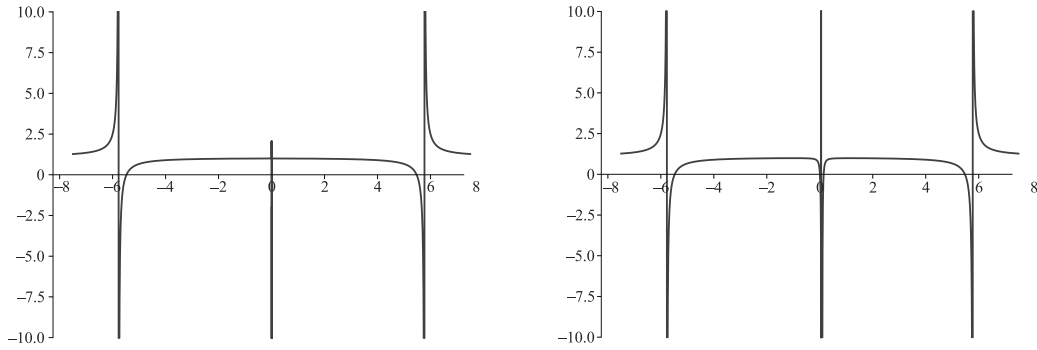


Рис. 2. (Цветной онлайн) Квадрат скорости звука c_s^2 , при выборе $\alpha = 0.1, \tau = 10$ (слева) и $\alpha = 1, \tau = 20$ (справа). В этом случае, квадрат скорости звука будет иметь как минимум 2 симметричные сингулярные точки и стремиться к 0 по мере того, как Вселенная становится изотропной

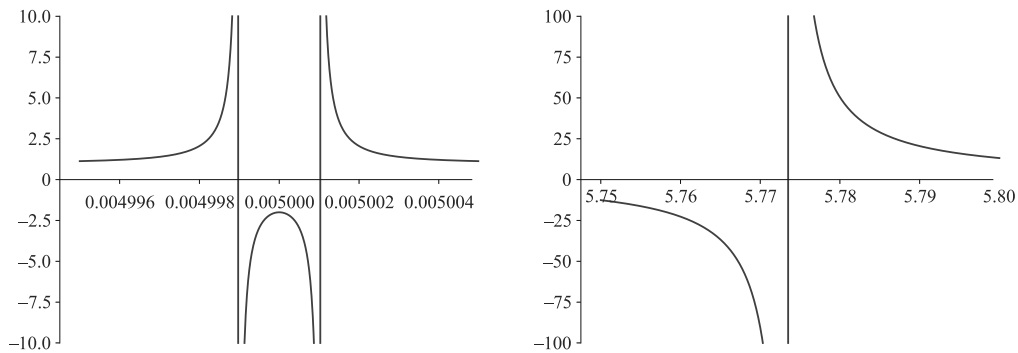


Рис. 3. (Цветной онлайн) Приближение окрестности сингулярных точек квадрата скорости звука c_s^2 для параметров $\alpha = 0.1, \tau = 10$

Для анализа стабильности скалярного поля численно был построен график квадрата скорости звука c_s^2 (рис. 2).

Графики (рис. 3) показывают, что в теории (22) скалярное поле становится неустойчивым даже при небольшом отклонении от изотропного фона. Это говорит о том, что результат, полученный ранее в работе [21], является очень частным случаем, напрямую связанным с изотропией фона.

6. Заключение. В данной работе мы построили действие для тензорных и скалярных мод возмущений метрического и скалярного полей над анизотропным фоном и проверили, остается ли устойчивым полученное ранее решение для Вселенной с отскоком. Оказалось, что устойчивость возмущений во Вселенной с отскоком напрямую связана с ее изотропией и даже при небольших отклонениях от нее квадрат скорости звука расходится и становится отрицательным. Тем не менее, наш результат открывает широкие возможности для поиска устойчивых решений и может использоваться для поиска

ка мощности спектра анизотропных моделей ранней Вселенной.

Авторы выражают благодарность Касперу Петерсу (Kasper Peeters) за разработку и поддержку программного обеспечения Cadabra2 [27], с помощью которого было выполнено большинство расчетов.

Финансирование работы. Данная работа поддерживается грантом от Российского научного фонда # 19-12-00393.

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. G. W. Horndeski, Int. J. Theor. Phys. **10**, 363 (1974); DOI: 10.1007/BF01807638.
2. A. Nicolis, R. Rattazzi, and E. Trincherini, Phys. Rev. D **79**, 064036 (2009); DOI: 10.1103/PhysRevD.79.064036; arXiv: 0811.2197 [hep-th].
3. C. Deffayet, G. Esposito-Farese, and A. Vikman, Phys. Rev. D **79**, 084003 (2009); doi: 10.1103/PhysRevD.79.084003; arXiv: 0901.1314 [hep-th].

4. D. B. Fairlie, J. Govaerts, and A. Morozov, Nucl. Phys. B **373**, 214 (1992); doi: 10.1016/0550-3213(92)90455-K; arXiv:hep-th/9110022.
5. T. Kobayashi, Rept. Prog. Phys. **82**(8), 086901 (2019); doi: 10.1088/1361-6633/ab2429; arXiv: 1901.07183 [gr-qc].
6. M. Libanov, S. Mironov, and V. Rubakov, JCAP **08**, 037 (2016); doi: 10.1088/1475-7516/2016/08/037; arXiv: 1605.05992 [hep-th].
7. T. Kobayashi, Phys. Rev. D **94**(4), 043511 (2016); doi: 10.1103/PhysRevD.94.043511; arXiv: 1606.05831 [hep-th].
8. Y. Cai, Y. Wan, H.-G. Li, T. Qiu, and Y.-S. Piao, JHEP **01**, 090 (2017); doi: 10.1007/JHEP01(2017)090; arXiv: 1610.03400 [gr-qc].
9. P. Creminelli, JCAP **11**, 047 (2016); doi: 10.1088/1475-7516/2016/11/047; arXiv: 1610.04207 [hep-th].
10. R. Kolevatov, JCAP **08**, 038 (2017); doi: 10.1088/1475-7516/2017/08/038; arXiv: 1705.06626 [hep-th].
11. Y. Cai and Y.-S. Piao, JHEP **09**, 027 (2017); doi: 10.1007/JHEP09(2017)027; arXiv: 1705.03401 [gr-qc].
12. Y. Cai, Eur. Phys. J. C **77**(6), 369 (2017); doi: 10.1140/epjc/s10052-017-4938-y; arXiv: 1701.04330 [gr-qc].
13. S. Mironov, V. Rubakov, and V. Volkova, JCAP **10**, 050 (2018); doi: 10.1088/1475-7516/2018/10/050; arXiv: 1807.08361 [hep-th].
14. S. Mironov, V. Rubakov, and V. Volkova, Phys. Rev. D **100**(8), 083521 (2019); doi: 10.1103/PhysRevD.100.083521; arXiv: 1905.06249 [hep-th].
15. S. Mironov, V. Rubakov, and V. Volkova, JCAP **05**, 024 (2020); doi: 10.1088/1475-7516/2020/05/024; arXiv: 1910.07019 [hep-th].
16. A. Ilyas, M. Zhu, Y. Zheng, Y.-F. Cai, and E. N. Saridakis, JCAP **09**, 002 (2020); doi: 10.1088/1475-7516/2020/09/002; arXiv: 2002.08269 [gr-qc].
17. A. Ilyas, M. Zhu, Y. Zheng, and Y.-F. Cai, JHEP **01**, 141 (2021); doi: 10.1007/JHEP01(2021)141; arXiv: 2009.10351 [gr-qc].
18. Y. Ageeva, P. Petrov, and V. Rubakov, JHEP **12**, 107 (2020); doi: 10.1007/JHEP12(2020)107; arXiv: 2009.05071 [hep-th].
19. Y. Ageeva, O. Evseev, O. Melichev, and V. Rubakov, Phys. Rev. D **102**(2), 023519 (2020); doi: 10.1103/PhysRevD.102.023519; arXiv: 2003.01202.
20. Y. Ageeva, P. Petrov, and V. Rubakov, Phys. Rev. D **104**(6), 063530 (2021); doi: 10.1103/PhysRevD.104.063530; arXiv: 2104.13412 [hep-th].
21. S. Mironov and A. Shtennikova, arXiv: 2212.03285 [gr-qc].
22. A. A. Starobinsky, S. V. Sushkov, and M. S. Volkov, Phys. Rev. D **101**(6), 064039 (2020); doi: 10.1103/PhysRevD.101.064039; arXiv: 1912.12320 [hep-th].
23. R. Galeev, R. Muharlamov, A. A. Starobinsky, S. V. Sushkov, and M. S. Volkov, Phys. Rev. D **103**(10), 104015 (2021); doi: 10.1103/PhysRevD.103.104015. arXiv: 2102.10981 [gr-qc].
24. V. A. Belinsky, I. M. Khalatnikov, and E. M. Lifshitz, Adv. Phys. **19**, 525 (1970); doi: 10.1080/00018737000101171.
25. C. B. Collins and S. W. Hawking, Astrophys. J. **180**, 317 (1973); doi: 10.1086/151965.
26. V. A. Belinsky, I. M. Khalatnikov, and E. M. Lifshitz, Adv. Phys. **31**, 639 (1982); doi: 10.1080/00018738200101428.
27. K. Peeters, J. Open Source Softw. **3**(32), 1118 (2018); doi: 10.21105/joss.01118.

Источник междиапазонных фотонных пар на основе фотонно-кристаллического волокна с непрерывной накачкой

А. Ф. Хайруллин⁺, А. М. Смирнова⁺, Н. М. Арсланов⁺, А. Б. Федотов*, С. А. Моисеев⁺, И. В. Федотов*, М. А. Смирнов⁺¹⁾

⁺Казанский квантовый центр, Казанский национальный исследовательский технический университет им. А. Н. Туполева, 420111 Казань, Россия

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

Поступила в редакцию 19 января 2024 г.

После переработки 29 января 2024 г.

Принята к публикации 30 января 2024 г.

Экспериментально демонстрируется генерация междиапазонных фотонных пар с длинами волн вблизи 0.5 и 1.6 мкм в фотонно-кристаллическом волокне при использовании непрерывной маломощной оптической накачки диодным лазером с центральной длиной волны 0.8 мкм. Установлено, что скорость генерации перепутанных фотонов при непрерывной накачке сопоставима со значениями, получаемыми при использовании импульсной накачки титан-сапфировым фемтосекундным лазером, если средняя мощность непрерывной накачки на порядок превышает среднюю мощность импульсной. Достигнутые скорости генерации фотонов обеспечиваются использованием фотонно-кристаллического волокна с малой эффективной площадью моды и специальным профилем дисперсии, при этом достигнутая низкая зашумленность выходного сигнала обеспечивается разделением несущих частот генерируемых фотонов на разные спектральные диапазоны.

DOI: 10.31857/S1234567824050033, EDN: CZFEWC

1. Введение. Фотонные пары (бифотоны) представляют собой двухфотонное состояние света, которое характеризуется высокой степенью неклассических корреляций, например, между временами их детектирования, энергиями фотонов в паре [1]. Благодаря этим свойствам источники фотонных пар стали надежной основой для развития новых направлений в квантовых технологиях, среди которых можно выделить квантовую визуализацию [2, 3], квантовую оптическую когерентную томографию [4], квантовую спектроскопию и нелинейную микроскопию [5, 6], оптическую квантовую память и квантовые коммуникации [7, 8].

Несущие частоты коррелированных фотонных пар могут сильно различаться, что существенно расширяет возможности указанных выше приложений, в особенности в области спектроскопии. В связи с этим, в последнее время активно развиваются методы генерации фотонных пар на частотах, располагающихся в различных спектральных диапазонах, например, в видимом и ближнем инфракрасном (ИК) [9, 10], а также в оптическом и терагерцовом диапазонах [11, 12]. Более того, генерация бифотонов с частотами, лежащими в видимом и телекомму-

никационном спектральном диапазоне, является одним из важных подходов в создании квантовой запутанности между удаленными узлами квантовой сети, реализации распределенных квантовых вычислений [10].

На сегодняшний день, наиболее распространенные методы генерации фотонных пар основаны на использовании явления спонтанного параметрического рассеяния (СПР) в кристаллах с квадратичной $\chi^{(2)}$ нелинейностью [13–16] и спонтанного четырехволнового смешения (СЧВС) в оптических волокнах с кубической $\chi^{(3)}$ нелинейностью [17–21]. Важной задачей для практического применения разрабатываемых методов является перевод таких источников на оптическую платформу, обеспечивающую их компактность и масштабируемость. Использование оптического волокна в качестве нелинейной среды для генерации имеет высокий потенциал для практической реализации такого перехода. В данном случае генерация бифотонов осуществляется в небольшой сердцевине волокна на протяжении всей его длины, что помогает компенсировать более низкий порядок нелинейности кварцевой сердцевины [22], а также облегчает непосредственное сопряжение с другими оптическими волокнами. Экспериментальные возможности существующих оптоволоконных реше-

¹⁾e-mail: maxim@kazanqc.org

ний [23] помогут выйти таким источникам за рамки громоздких экспериментальных установок и трансформироваться в виде миниатюрных инструментов, что, безусловно, расширит их применение на практике.

При разработке оптоволоконного источника фотонных пар необходимо, чтобы дисперсия волокон обеспечивала фазовое согласование между фотонами возбуждающего лазерного излучения (накачки) и генерируемыми фотонами. Реализовать данное согласование для случая, когда спектральные линии фотонов расположены в видимом и инфракрасном (телекоммуникационном) диапазонах, является нетривиальной задачей, и, к примеру, не может быть реализовано на основе стандартных одномодовых оптических волокон.

В то же время суженные микро/нано волокна [24, 25], а также фотонно-кристаллические волокна (ФКВ) [26, 27] предоставляют широкие возможности в настройке фазового согласования и повышении эффективности генерации фотонных пар благодаря возможности контролируемого изменения геометрических параметров данных волокон. В случае суженных волокон была продемонстрирована генерация фотонных пар вблизи длин волн 0.6 и 0.85 мкм [24], 0.9 и 1.3 мкм [25] с использованием импульсной накачки. В случае фотонно-кристаллических волокон в работе [19] была продемонстрирована возможность генерации видимо-телекоммуникационных фотонных пар с длинами волн вблизи 0.5 и 1.6 мкм при использовании в качестве накачки фемтосекундных лазерных импульсов, также было показано, что в этом случае двухфотонный волновой пакет генерируется в одной спектральной моде, т.е. находится в факторизованном состоянии. Отметим, что на текущий момент не были экспериментально исследованы возможности генерации видимо-телекоммуникационных фотонных пар в фотонно-кристаллических волокнах с использованием непрерывной накачки, что в высокой степени актуально для практических применений источников на интегральной платформе, поскольку использование маломощных лазеров накачки может представлять интерес для малогабаритных устройств [28].

2. Генерация фотонных пар в оптических волокнах при непрерывной накачке. СЧВС представляет собой параметрический процесс, основанный на нелинейной восприимчивости третьего порядка $\chi^{(3)}$ сердцевинны волокна, при котором два фотона накачки преобразуется в дочерние два фотона с различающимися между собой несущими частотами. Упомянутые фотоны обычно именуют сигнальными

и холостыми, что носит условный характер. Для возникновения явления необходимо соблюдение условий закона сохранения энергии и фазового синхронизма, которые записываются в следующем виде [29]:

$$\omega_s + \omega_i = 2\omega_p, \quad (1)$$

$$\Delta k = k_i(\omega_i) + k_s(\omega_s) - 2k_p(\omega_p) + 2\gamma P_p = 0, \quad (2)$$

где $\omega_{p,s,i}$ – частоты накачки сигнальной и холостой волн; $k_{p,s,i}$ – волновые вектора накачки, сигнальной и холостой волн; P_p – пиковая мощность накачки, $\gamma = 2\pi n_2 / \lambda A_{\text{eff}}$ – коэффициент нелинейности волокна, где n_2 – нелинейный показатель преломления, A_{eff} – эффективная площадь моды волокна, λ – длина волны накачки. Как видно из выражения (2), дисперсия оптического волокна играет важную роль в процессе СЧВС, управляя спектральными характеристиками генерируемых фотонов. В этой связи, возможности дизайна микроструктуры воздушных отверстий на этапе проектирования фотонно-кристаллических волокон дало возможность создавать световоды с различным профилем дисперсии групповых скоростей, которые невозможно реализовать в стандартных оптических волокнах.

Фотонные пары, генерируемые на выходе волокна, описываются как двухфотонное состояние [30]:

$$|\Psi\rangle \propto \iint d\omega_s d\omega_i F(\omega_s, \omega_i) \hat{a}_s^+(\omega_s) \hat{a}_i^+(\omega_i) |0_s\rangle |0_i\rangle, \quad (3)$$

где $|\omega_s, \omega_i\rangle$ описывает состояние фотонной пары; $F(\omega_s, \omega_i)$ является функцией совместной спектральной амплитуды (ССА), модуль квадрата которой имеет смысл вероятности генерации фотонной пары с круговыми частотами фотонов ω_s и ω_i . Функция ССА зависит от спектральной огибающей накачки и выполнения условий фазового синхронизма как [30]:

$$F(\omega_s, \omega_i) = \alpha(\omega_s + \omega_i) \exp\left(\frac{i\Delta\beta L}{2}\right) \text{sinc}\left(\frac{\Delta\beta L}{2}\right), \quad (4)$$

где L является длиной оптического волокна, $\alpha(\omega_s + \omega_i)$ – функция огибающей спектра накачки. Функция ССА определяет как спектральный состав генерируемых фотонов, так и их частотно-временные корреляционные свойства. Обратное Фурье-преобразование функции ССА позволяет найти временной вид корреляционной функции второго порядка $G^{(2)}(\tau)$, ширина временного профиля которой задает время корреляции T_c , имеющее важное значение в практических приложениях.

Скорость генерации фотонных пар на выходе оптоволоконного источника r связана с пиковой

мощностью накачки в виде квадратичной зависимости $r \propto \gamma P_p^2$ [18]. Обычно переход от непрерывной накачки к импульсному возбуждению подразумевает значительное увеличение ее пиковой мощности P_p на несколько порядков, при одинаковых значениях средней мощности $\tilde{P}$. Следствием такого усиления могло бы являться усиление и скорости генерации фотонных пар согласно квадратичной зависимости. Однако этому препятствует скажность S излучения используемых импульсных источников. Скорость генерации фотонных пар в случае импульсной накачки будет масштабироваться как $r \propto P_p^2/S = \tilde{P}^2 S$. Соответственно, при одинаковых средних значениях мощности накачки увеличение генерации будет соответствовать не квадратичному усилению самой накачки, а линейному увеличению ее скажности. К примеру, в случае лазеров с длительностью импульсов $\tau_p \approx 1000$ фс и периодом их следования $R_p = 76$ МГц, значение S составит $\sim 10^4$. Компенсировать такую скажность возможно с помощью увеличения мощности непрерывной накачки в 100 раз. Однако, увеличение мощности накачки обычно влечет за собой пропорциональный рост количества шумовых фотонов в выходном сигнале, источником которых является процесс спонтанного комбинационного рассеяния [18, 22], либо сама накачка, излучение которой частично проникает в измерительные каналы даже после спектральной фильтрации. Таким образом, поиск и исследование оптических волноводов, обеспечивающих эффективную генерацию фотонных пар при фемтосекундных лазерных импульсах, средняя мощность которых находится в области микроватт, открывает дорогу для переноса данных волноводов на платформу с уже маломощной диодной накачкой, мощность которой лежит в области нескольких милливатт, что существенно снижает драматическое влияние шумовых фотонов.

3. Экспериментальная установка. В качестве нелинейной среды для генерации бифотонов использовалось одномодовое ФКВ (NL-PM 750, NKT Photonics) с двумя длинами волн нулевой дисперсии вблизи 750 и 1270 нм. Данное ФКВ обладает малой эффективной площадью моды $A_{\text{eff}} \approx 2$ мкм, что объясняет высокое значение его коэффициента нелинейности $\gamma \sim 95$ (Вт км) $^{-1}$ [31]. Спектральная зависимость дисперсии групповых скоростей (ДГС) $\beta^{(2)}(\lambda)$ представлена на рис. 1а. На рисунке 1б изображена рассчитанная на основе ДГС зависимость длин волн генерируемых фотонных пар от длины волны лазерной накачки, иллюстрирующая указанные выше возможности. Часто данную зависимость называют кривой фазового синхронизма, поскольку

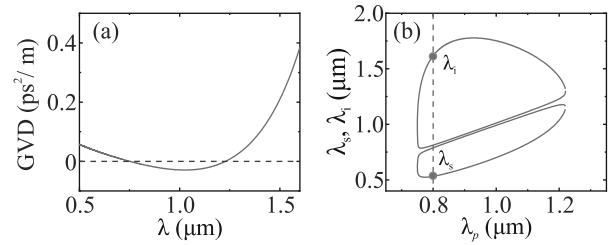


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Спектральная зависимость ДГС используемого в генерации фотонных пар оптического волокна. (б) – Зависимость длин волн фотонных пар на выходе из данного оптического волокна в зависимости от длины волны входного лазерного излучения (накачка). Точками обозначены длины волн фотонов для накачки с длиной волны вблизи 800 нм

ку ее значения определяются на основе выражений (1)–(2). Предварительный численный анализ режимов СЧВС на основе представленной дисперсионной зависимости показал, что вблизи длины волны поля накачки $\lambda_p = 0.8$ мкм в данном ФКВ могут генерироваться двухфотонные состояния света с длинами волн вблизи $\lambda_i = 1.6$ мкм (холостой фотон) и $\lambda_s = 0.5$ мкм (сигнальный фотон). Представленные результаты наглядно демонстрируют возможности генерации фотонных пар в видимом и телекоммуникационном диапазонах, а также перестройку их длин волн в обширном спектральном диапазоне с помощью сдвига длины волны возбуждающего поля. При этом с помощью небольшого сдвига λ_p можно добиться точного попадания длины волны холостого фотона в стандартный телекоммуникационный диапазон вблизи 1.55 мкм.

Принципиальная схема экспериментальной установки по генерации фотонных пар представлена на рис. 2. Генерация осуществлялась с использованием фемтосекундных лазерных импульсов от Ti:Sa-лазера (Mira-HP, Coherent) на длине волны 800 нм и частотой повторения импульсов $R_p = 76$ МГц (рис. 2а), либо с помощью непрерывного диодного лазера (LuxX 808-140, Omicron-Laserage) с практически такой же длиной волны (рис. 2б). Излучение накачки заводилось в ФКВ через асферическую линзу, а его мощность контролировалась на выходе из волокна.

В случае Ti:Sa-лазера длительность фемтосекундных импульсов составляла ~ 150 фс. Далее лазерные импульсы проходили через оптическую систему на основе дифракционной решетки, линзы и нескольких зеркал, в которой с помощью фильтрации боковых компонент спектральной полосы длительность импульсов увеличивалась до ~ 500 фс. Частотная полоса лазерных импульсов на выходе Ti:Sa-

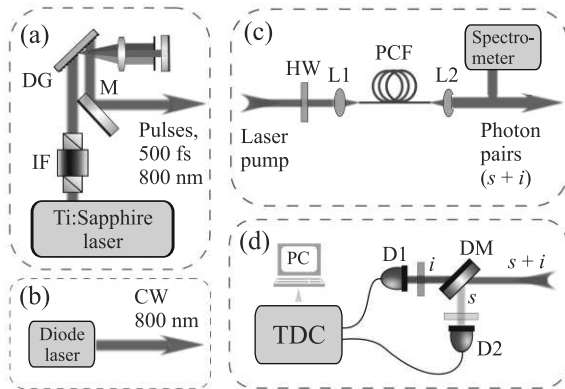


Рис. 2. (Цветной онлайн) Принципиальная схема экспериментальной установки для генерации фотонных пар. На рисунке приведены следующие обозначения: Ti:Sapphire laser – импульсный лазер накачки; IF – изолятор Фарадея; M – зеркало; DG – дифракционная решетка; P – поляризатор; HW – полуволновая пластинка; PCF – фотонно-кристаллическое волокно; L1 и L2 – асферические линзы; DM – система оптических фильтров, обеспечивающая разделения бифотонов в два канала и их фильтрацию от посторонних шумовых фотонов; D1 – детекторы одиночных фотонов видимого диапазона; D2 – детекторы одиночных фотонов ИК-диапазона, TDC – время цифровой преобразователь

лазера регулировалась с помощью дополнительной спектральной фильтрации.

Сгенерированные в результате процесса СЧВС на выходе из волокна сигнальные и холостые фотоны разделялись на два канала с помощью длинноволнового фильтра с длиной волны отсечки 850 нм, работающего в режиме дихроичного зеркала. В сигнальном измерительном канале был установлен каскад из четырех коротковолновых оптических фильтров с линиями отсечки на 750 нм (две штуки), 700 и 600 нм, обеспечивающие высокие значения оптической плотности (OD) на длине волны накачки ($OD \approx 21$ при $\lambda_p = 800$ нм). В холостом измерительном канале был установлен каскад из трех длинноволновых оптических фильтров с линиями отсечки на 1050, 1100 и 1400 нм, обеспечивающие сравнимые значения оптической плотности на длине волны накачки с учетом упомянутого выше фильтра, разделяющего бифотоны на два канала. Скорости отсчетов одиночных фотонов регистрировались с помощью однофотонных детекторов на основе лавинных фотодиодов: в сигнальном канале – детектором одиночных фотонов в видимом диапазоне (SPDM Count NIR, Laser Components), в холостом – детектором одиночных фотонов в ИК-диапазоне (ID230, IDquantique). Выходные сигналы с детекторов поступали на времяцифровой преобразователь (ID801, IDquantique), где

с помощью встроенной программируемой логической интегральной схемы численно обрабатывались. В результате данной обработки вычислялись скорости отсчетов фотонов на детекторах, а также совпадения между ними. Спектры фотонов измерялись с помощью монохроматора с детектором на основе охлаждаемой ПЗС-матрицы (S7031-1006S, Hamamatsu).

4. Результаты и их обсуждение. В первую очередь были измерены спектры сигнальных фотонов λ_s , генерируемых на выходе ФКВ для каждого режима накачки (импульсного и непрерывного), которые представлены на рис. 3а, б. Сравнение графиков рис. 3а и б показывает, что в обоих режимах спектральная форма сигнальных фотонов практически не изменяется, за исключением небольшого уменьшения ширины спектральной полосы с ≈ 1.0 нм в импульсном режиме до ≈ 0.8 нм в непрерывном режиме. Зная конкретные значения λ_s и λ_p , нетрудно найти длину волны для соответствующих холостых фотонов λ_i на основе закона сохранения энергии для СЧВС-процесса. Так при длине волны накачки $\lambda_p = 800$ нм и длине волны сигнальных фотонов $\lambda_s = 529$ нм, холостые фотоны будут находиться вблизи длины волны $\lambda_i = 1640$ нм.

Далее были проведены измерения скоростей счета фотонов для выходного излучения (см. схему на рис. 3д) для каждого режима возбуждения. Были измерены скорости счета фотонов в сигнальном канале N_s холостом канале N_i , а также скорости счета их совпадений N_{si} на выходе из ФКВ как функции усредненной мощности накачки $\bar{P}$. Результаты экспериментов для N_s и N_i представлены на рис. 3с и д. Зависимость для сигнальных фотонов с хорошей точностью аппроксимируется функцией вида $N_s(P) \propto \bar{P}^2$, как это показано на рис. 3с и д, что характерно для СЧВС-процесса. В тоже время при импульсной накачке зависимость для холостых фотонов аппроксимируется уже функцией иного вида $N_i(P) = a\bar{P} + b\bar{P}^2$ (a – константа), где сравнительно небольшой линейный вклад $a\bar{P}$ (при $\bar{P} = 4$ мВт составляет треть от всего сигнала), вероятнее всего, обусловлен шумовыми фотонами в холостом канале. Наиболее вероятным источником шума может выступать остаточное излучение от спонтанного комбинационного рассеяния света в сердцевине световода. Однако, как хорошо видно на рис. 3д, в случае непрерывной накачки скорость счета в холостом канале N_i описывается практически линейной зависимостью $N_i \propto \bar{P}$. Такая зависимость является идентификатором того, что в данном режиме основной вклад в выходном сигнале с холостого канала вносят шумовые фотоны. Увеличение при этом шумового

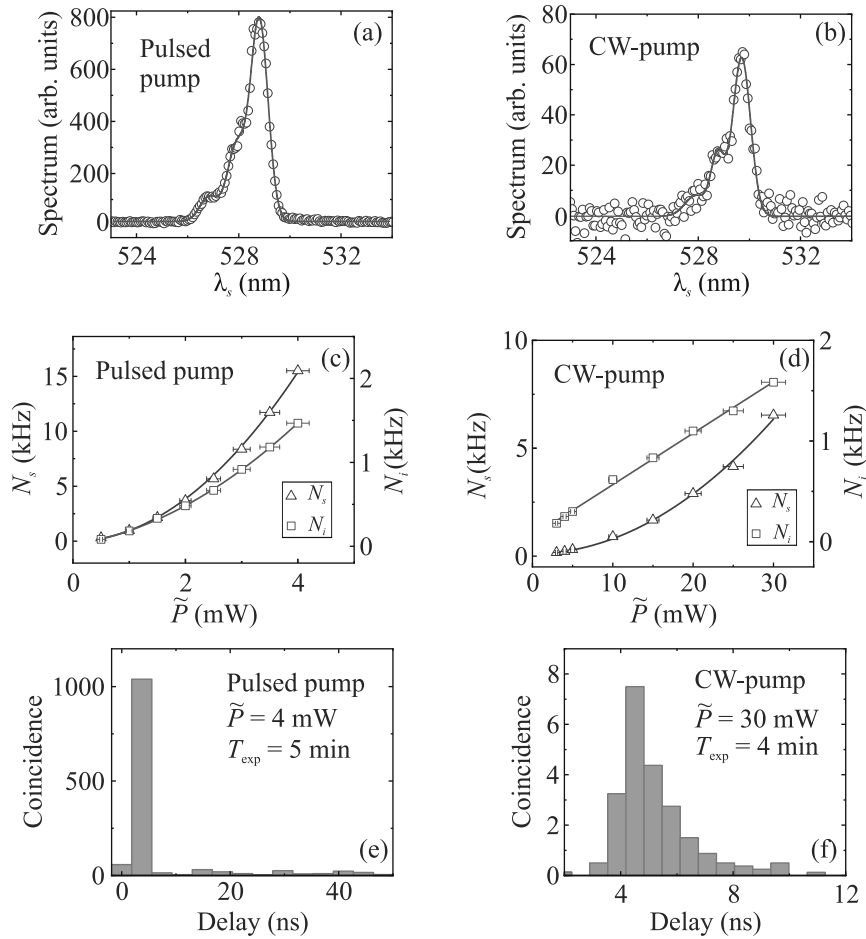


Рис. 3. (Цветной онлайн) Сравнение характеристик бифотонов в двух режимах генерации – при импульсной (а), (с), (е) и непрерывной накачке (b), (d), (f). На рисунке представлены: спектры сигнальных фотонов (а), (b); скорости счета фотонов в сигнальном и холостом каналах (с), (d); гистограммы совпадений (е), (f)

вклада можно связать с увеличением средней мощности непрерывной накачки, необходимой для получение регистрируемой в эксперименте генерации фотонных пар.

Наглядным проявлением неклассических свойств генерируемого излучения являются гистограммы для временной зависимости совпадений. На рисунке 3е, f представлены данные гистограммы, измеренные для обоих режимов возбуждения источника. В случае импульсного лазера гистограммы совпадений имеют вид отдельных столбиков с резким пиком, как показано на рис. 3е. Этот пик соответствует совпадениям отсчетов детекторов, обусловленных генерацией коррелированных по времени фотонов. Нормирование значения этого пика на значение на время измерения T_{exp} определяет скорость совпадений N_{si} . Остальные пики на гистограмме соответствуют случайным совпадениям между отсчетами детекторов. Несмотря на более высокий уровень шумов в холостом канале в случае

непрерывной накачки, совпадения между каналами по-прежнему продолжают отчетливо наблюдаться. Однако в этом случае гистограмма имеет вид одиночного пика, огибающая которого показана рис. 3f. Таким образом, ключевым отличием непрерывного режима возбуждения от импульсного при генерации фотонных пар в ФКВ является большая зашумленность сигнала в холостом (длинноволновом) измерительном канале, а также наличие одиночного пика на гистограмме совпадений.

Чтобы охарактеризовать производительность и эффективность нашего источника, мы вычислили кросс-корреляционную функцию второго порядка $g^{(2)}(\tau)$ на основе скорости измеренных совпадений отсчетов между каналами N_{si} . В случае импульсного режима возбуждения функцию $g^{(2)}(\tau)$ можно найти по формуле [32, 33]:

$$g^{(2)}(\tau) = \frac{N_{si}(\tau)R_p}{N_s N_i}, \quad (5)$$

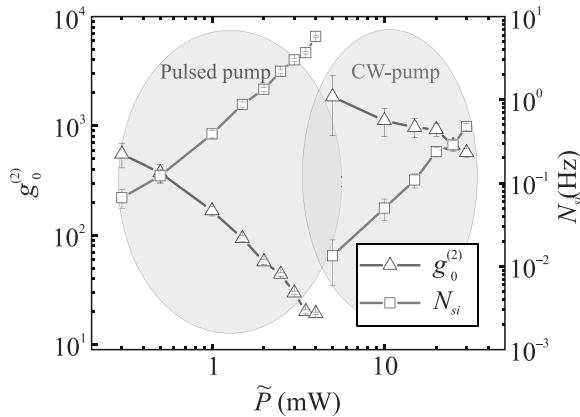


Рис. 4. (Цветной онлайн) Скорости счета совпадений фотонных пар и значения корреляционной функции второго порядка $g^{(2)}(0)$ в зависимости от усредненной мощности импульсной фемтосекундной накачки ($\tilde{P} \leq 4$ мВт) и непрерывной диодной накачки ($\tilde{P} \geq 5$ мВт)

где $N_{si}(\tau)$ частота двухфотонных совпадений при заданной временной задержке между двумя событиями $\tau = t_1 - t_2$. При измерении функции $g^{(2)}(\tau)$, мы брали во внимание случай, когда $\tau = 0$, при котором достигается максимум значения $g^{(2)}$. На рисунке 4 представлены результаты измерений. Максимальное значение $g_0^{(2)} = 550$ достигается при средней мощности накачки всего 0.3 мВт, при этом пиковая мощность в импульсе накачки составляет ~ 8 Вт. Отметим, что при этом скорость генерации фотонных пар на выходе из волокна значительно превосходит скорость зарегистрированных совпадений в эксперименте ($r \gg N_{si}$). Вызвано это тем, что из-за оптических потерь в измерительных каналах экспериментальной установки не все фотонные пары детектируются. Указанные оптические потери связаны с более низкой эффективностью сбора излучения, длины волн которого расположены в разных спектральных диапазонах, на выходе из фотонно-кристаллического волокна, а также потери связаны с низкой квантовой эффективностью используемого детектора в холостом канале, которая составляла всего несколько процентов. Учитывая, что все измеряемые скорости счета пропорциональны скорости генерации бифотонов на выходе из волокна, оценить значение r можно по формуле $r = R_p/g_0^{(2)}$. Таким образом, максимальному значению скорости совпадений в импульсном режиме $N_{si} = 5$ Гц ($g_0^{(2)} = 20$) соответствует скорость генерации на выходе из волокна, равная $r \approx 4$ МГц. Стоит отметить, что скорость регистрации фотонов в предложенной схеме может быть в дальнейшем увеличена с помощью улучшения эффективности сбора междиапазонного излучения, генерируемого на вы-

ходе волокна, и его сопряжения со стандартными волокнами, а также с помощью использования в холостом канале детектора с более высоким значением квантовой эффективности.

В случае непрерывной накачки корреляционную функцию $g^{(2)}$ мы вычисляли с помощью другого выражения как [28]:

$$g^{(2)}(\tau) = \frac{N_{si}(\tau)}{N_s N_i T_b}, \quad (6)$$

где T_b – это временной интервал, в течение которого регистрируются совпадения.

Анализируя выражение (6), становится очевидным, что с ростом величины T_b значения функции пропорционально убывают. Следовательно, для максимизации $g_0^{(2)}$ необходимо обеспечить регистрацию скорости совпадений в минимально доступном временном интервале. Одним из факторов, ограничивающих данную минимизацию в эксперименте, является временное разрешение (джиттер) используемых детекторов в измерительных каналах. Используемые в наших экспериментах однофотонные детекторы обладают временным разрешением $T_{j,s} = 1.0$ нс в сигнальном канале и $T_{j,i} = 0.2$ нс в холостом канале, приводя к соответствующему уширению временного распределения $N_{si}(\tau)$ на рис. 3f. Использование детекторов с более низкими значениями времени T_j , например, на основе сверхпроводящих нанопроводов с $T_j \sim 20$ пс, позволит значительно увеличить максимальные значения $g_0^{(2)}$. Таким образом, чтобы исключить влияние детекторов при вычислении $g_0^{(2)}$, мы использовали в своих расчетах T_b , равное 81 пс, которое соответствует времени дискретизации используемого время-цифрового преобразователя.

Экспериментальные зависимости N_{si} и вычисленные на их основе значения $g_0^{(2)}$ представлены также на рис. 4. Значения скорости совпадений N_{si} находились на основе гистограмм путем суммирования отсчетов во временном интервале 1.6 нс. Максимальное значение $g_0^{(2)} \approx 2000$ достигается при мощности непрерывной накачки всего 5 мВт. Найденное значение $g_0^{(2)}$ сравнимо с данными, полученными при непрерывной накачке волокна с подвесной сердцевинной в работе с использованием сверхпроводящих детекторов [28]. Максимальное значение скорости совпадений в непрерывном режиме $N_{si} = 0.4$ Гц ($g_0^{(2)} = 560$). Учитывая соотношение между N_{si} и r , полученное в импульсном режиме возбуждения при небольшом шумовом сигнале на той же самой установке, можем оценить максимальное r для непрерывного режима, равным ~ 0.3 МГц.

Таким образом, была продемонстрирована генерация междиапазонных бифотонов с использованием фотонно-кристаллического волокна с непрерывной накачкой. Использование фотонно-кристаллического волокна с нестандартным дисперсионным профилем, характеризуемым двумя длинами нулевой дисперсии, обеспечило генерацию фотонных пар в видимом и телекоммуникационном диапазонах на длинах волн вблизи 0.5 и 1.6 мкм. Сплошная кварцевая сердцевина в сочетании с малой модовой площадью волокна упростили использование маломощного непрерывного лазера в качестве накачки и обеспечили скорость генерации, сравнимую с импульсными фемтосекундными лазерными источниками. Последнее обстоятельство представляет высокий интерес для создания малогабаритных интегральных источников бифотонов.

Авторы выражают благодарность профессору А. М. Желтикову за поддержку и ценные обсуждения.

Финансирование работы. Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России (Регистрационный номер НИОКТР 121020400113-1).

Конфликт интересов. Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. Д. Н. Клышко, Успехи физических наук **158**(6), 327 (1989).
2. P.-A. Moreau, E. Toninelli, T. Gregory, and M. J. Padgett, Nat. Rev. Phys. **1**(6), 367 (2019).
3. S. Magnitskiy, D. Agapov, and A. Chirkin, Opt. Lett. **47**(4), 754 (2022).
4. A. Vallés, G. Jiménez, L. J. Salazar-Serrano, and J. P. Torres, Phys. Rev. A **97**(2), 023824 (2018).
5. F. Schlawin, K. E. Dorfman, and S. Mukamel, Acc. Chem. Res. **51**(9), 2207 (2018).
6. Z. He, Y. Zhang, X. Tong, L. Li, and L. V. Wang, Nat. Commun. **14**(1), 2441 (2023).
7. M. Minnegaliev, K. Gerasimov, and S. Moiseev, JETP Lett. **117**(11), 865 (2023).
8. C. Jones, D. Kim, M. T. Rakher, P. G. Kwiat, and T. D. Ladd, New J. Phys. **18**(8), 083015 (2016).
9. D. A. Kalashnikov, A. V. Paterova, S. P. Kulik, and L. A. Krivitsky, Nat. Photonics **10**(2), 98 (2016).
10. X. Lu, Q. Li, D. A. Westly, G. Moille, A. Singh, V. Anant, and K. Srinivasan, Nat. Phys. **15**(4), 373 (2019).
11. A. Leontyev and G. K. Kitaeva, JETP Lett. **112**, 269 (2020).
12. P. A. Prudkovskii, JETP Lett. **114**, 173 (2021).
13. K. Katamadze, A. Pashchenko, A. Romanova, and S. Kulik, JETP Lett. **115**(10), 581 (2022).
14. K. Katamadze, N. Borshchevskaya, I. Dyakonov, A. Paterova, and S. Kulik, Phys. Rev. A **92**(2), 023812 (2015).
15. O. Ermishev, M. Smirnov, A. Khairullin, and N. Arslanov, Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. **86**(12), 1502 (2022).
16. M. V. Chekhova, S. Germanskiy, D. B. Horoshko, G. K. Kitaeva, M. I. Kolobov, G. Leuchs, C. R. Phillips, and P. A. Prudkovskii, Opt. Lett. **43**(3), 375 (2018).
17. L. Wang, C. Hong, and S. Friberg, Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics **3**(5), 346 (2001).
18. J. Rarity, J. Fulconis, J. Dulligall, W. Wadsworth, and P. S. J. Russell, Opt. Expr. **13**(2), 534 (2005).
19. C. Söller, B. Brecht, P. J. Mosley, L. Y. Zang, A. Podlipensky, N. Y. Joly, P. S. J. Russell, and C. Silberhorn, Phys. Rev. A **81**(3), 031801 (2010).
20. K. Petrovnin, M. Smirnov, I. Fedotov, A. Voronin, I. Latypov, A. Shmelev, A. Talipov, T. Matveeva, A. Fedotov, S. Moiseev, and A. M. Zheltikov, Laser Phys. Lett. **16**(7), 075401 (2019).
21. N. Petrov, A. Voronin, A. Fedotov, and A. Zheltikov, Phys. Rev. A **100**(3), 033837 (2019).
22. G. P. Agrawal, J. Opt. Soc. Am. B **28**, A1 (2011).
23. G. P. Agrawal, *Fiber-optic communication systems*, John Wiley & Sons, Hoboken, New Jersey, U.S. (2012).
24. J.-H. Kim, Y. S. Ihn, Y.-H. Kim, and H. Shin, Opt. Lett. **44**, 447 (2019).
25. A. A. Shukhin, J. Keloth, K. Hakuta, and A. A. Kalachev, Phys. Rev. A **101**, 053822 (2020).
26. A. M. Желтиков, Успехи физических наук **177**(7), 737 (2007).
27. K. Garay-Palmett, D. B. Kim, Y. Zhang, F. A. Domínguez-Serna, V. O. Lorenz, and A. B. U'Ren, J. Opt. Soc. Am. B **40**, 469 (2023).
28. J. Hammer, M. V. Chekhova, D. R. Häupl, R. Pennetta, and N. Y. Joly, Phys. Rev. Res. **2**, 012079 (2020).
29. J. Fulconis, O. Alibart, W. Wadsworth, P. S. J. Russell, and J. Rarity, Opt. Express **13**(19), 7572 (2005).
30. A. Migdall, S. V. Polyakov, J. Fan, and J. C. Bienfang, *Single-photon generation and detection: physics and applications*, Academic Press, Elsevier, Amsterdam (2013).
31. NKT Photonics, Nonlinear Fibers Datasheet, <https://www.nktphotonics.com/products/optical-fibers-and-modules/nonlinear-photonic-crystal-fibers/>
32. M. Cordier, P. Delaye, F. G  r  me, F. Benabid, and I. Zaquine, Sci. Rep. **10**(1), 1650 (2020).
33. O. A. Ivanova, T. S. Iskhakov, A. N. Penin, and M. V. Chekhova, Quantum Electronics **36**(10), 951 (2006).

Модель связанных квантовых мемристоров на основе пойманного в ловушку одиночного иона $^{171}\text{Yb}^+$

С. Ю. Стремоухов^{1*}, П. А. Форш^{1*}, К. Ю. Хабарова⁺, Н. Н. Колачевский⁺

⁺ Физический институт имени П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

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

¹ Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, 123182 Москва, Россия

Поступила в редакцию 19 января 2024 г.

После переработки 6 февраля 2024 г.

Принята к публикации 7 февраля 2024 г.

Предложен способ совместного применения двух связанных друг с другом квантовых мемристоров на одиночном ионе $^{171}\text{Yb}^+$ посредством использования оптического и радиочастотного переходов, возбуждаемых резонансными лазерными полями. В результате осуществляется создание когерентного отображения квантового входного состояния на выходное состояние. Предложенный способ позволяет задействовать всего один ион для управления статистическими весами в двухслойных персептронах.

DOI: 10.31857/S1234567824050045, EDN: EJZMFE

Введение. Мемристоры представляют собой удобную платформу для создания нейронных сетей [1]. Практически во всех созданных и исследованных на данный момент мемристорах входной и выходной сигналы (электрический ток и напряжение) являются классическими [2]. Однако, в последнее время активно исследуются возможности создания мемристивного устройства, которое демонстрирует кривую гистерезиса в характеристике ввода-вывода и при этом обладает подлинно квантовым поведением, позволяющим осуществлять манипулирование квантовой информацией. Концепция квантового мемристора была введена в работе [3].

К настоящему времени предложена реализация квантовых мемристоров на нескольких платформах: квантовая фотоника [4, 5], сверхпроводящие схемы [3, 6–9], ионные ловушки [10] и схемы, основанные на особенностях взаимодействия излучения с веществом [11, 12]. Некоторые из них получили свою экспериментальную реализацию [13, 14]. В настоящее время уже развиваются методы машинного обучения единичных и связанных квантовых мемристоров [13, 15].

Недавно нами была предложена концепция квантового мемристора на ультрахолодных ионах, захваченных в ловушки Пауля [10]. Показано, что при определенных значениях параметров лазерных импульсов, которые обеспечивают движение населенности выделенных уровней иона, осуществляется гистерезисная зависимость выходного сигнала от входно-

го. Рассмотрены конкретные уровни ионов $^{171}\text{Yb}^+$, которые являются подходящими и удобными для экспериментальной реализации квантового мемристора.

В настоящей работе предложена схема, задействующая две тройки уровней (два способа реализации квантового мемристора), между которыми инициируются осцилляции Раби. Такой подход позволяет задавать два набора статистических весов (каждый для своей тройки уровней), что заметно расширяет возможности применения ультрахолодных ионов в нейроморфных вычислениях.

Квантовый мемристор на захваченных ионах. Теоретическая концепция квантового мемристора на захваченных ионах представлена в [10]. Кратко опишем ее. Необходимо выбрать три уровня $|g\rangle$, $|e\rangle$ и $|a\rangle$. Используя различные техники (резонансное лазерное или микроволновое возбуждение, рамановское возбуждение), возможно инициировать осцилляции Раби между уровнями $|g\rangle$ и $|e\rangle$, т.е. под действием такого возмущения населенность уровней иона периодически переходит с $|g\rangle$ на $|e\rangle$ и обратно. Волновая функция такой двухуровневой системы, при этом, выражается суперпозицией

$$|\Psi_{\text{in}}\rangle = \alpha|g\rangle + \beta|e\rangle,$$

где $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.

Вероятность возбуждения уровня $|e\rangle$ изменяется с течением времени t и дается выражением [16]

¹) e-mail: sustrem@gmail.com

$$|\beta|^2 = \sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right),$$

где Ω – частота Раби для переходов $|g\rangle \leftrightarrow |e\rangle$.

Также путем резонансного воздействия на ион другим электромагнитным полем можно инициировать переход с одного из уровней $|g\rangle$, $|e\rangle$, например, с уровня $|g\rangle$ на некоторый уровень $|a\rangle$. При этом переход из состояния $|e\rangle$ в $|a\rangle$ не происходит. Вероятностью такого перехода можно управлять, задавая длительность τ лазерного импульса и/или его амплитуду. Подбирая значения данных параметров, вероятность перехода $|g\rangle \rightarrow |a\rangle$ [16]

$$|\gamma|^2 = \sin^2\left(\frac{\tilde{\Omega} t}{2}\right)$$

($\tilde{\Omega}$ – частота Раби для переходов $|g\rangle \leftrightarrow |a\rangle$) можно менять в пределах от 0 до 1.

Факт возбуждения уровня $|a\rangle$ можно зарегистрировать, например, с помощью широко известного метода квантовых скачков (*electron shelving*, МКС) [17–19].

Волновая функция иона после инициирования перехода $|g\rangle \rightarrow |a\rangle$ будет

$$|\Psi_{\text{out}}\rangle = \alpha\sqrt{1-|\gamma|^2}|g\rangle + \beta|e\rangle + \gamma|a\rangle.$$

Выберем в качестве входного сигнала величину

$$x = |\langle g|\Psi_{\text{in}}\rangle|^2 = |\alpha|^2.$$

Выходным сигналом будет служить

$$y = |\langle g|\Psi_{\text{out}}\rangle|^2 = |\alpha|^2(1-|\gamma|^2).$$

При этом зависимость выходного сигнала от входного дается равенством

$$y = (1-|\gamma|^2)x.$$

Поскольку $|\gamma|^2$ можно изменять с течением времени, то данная вероятность играет роль параметра состояния s [20], т.е. $s = |\gamma|^2$. Зависимость $y(x)$ имеет вид, аналогичный уравнению, характерному для классического мемристора. При этом параметр состояния можно изменять, подбирая длительность лазерных импульсов и/или их амплитуду, произвольным образом. Для экспериментальной реализации квантового мемристора необходимо иметь возможность изменять значение s (по определенному закону [10]) в течение какого-то временного интервала (периода) T и организовать обратную связь для изменения значения s для следующего периода T .

Необходимое условие для реализации описанной выше схемы состоит в том, что суммарное время регистрации населенности уровня $|a\rangle(\tau_{\text{reg}})$ и длительности импульса, возбуждающего переход $|g\rangle \rightarrow$

$|a\rangle(\tau_2)$, должно быть много меньше периода осциллирующих Раби между уровнями $|g\rangle$ и $|e\rangle$, т.е.

$$\tau_2 + \tau_{\text{reg}} \ll \frac{2\pi}{\Omega}. \quad (1)$$

Трехуровневые схемы в ионе $^{171}\text{Yb}^+$. Для экспериментальной реализации квантового мемристора на ионах прежде всего необходимо провести глубокое охлаждение иона в ловушке Пауля. С целью манипулирования одиночным ионом можно использовать трехмерные ловушки, которые в изготовлении несколько проще линейных и обладают хорошим оптическим доступом к области захвата иона. Охлаждение иона может быть реализовано стандартными методами, например, путем доплеровского или симпатического лазерного охлаждения [21, 22]. Для охлаждения до основного колебательного состояния успешно применяются метод охлаждения на боковых частотах [23] и метод электромагнитно-индуцированной прозрачности [24–27]. Сложность в экспериментальной реализации мемристора на ионах заключается в выполнении условия, накладываемого на время регистрации и длительность второго импульса (1). Обычно при реализации метода квантовых скачков на широком дипольном переходе с шириной линии в десятки МГц время регистрации составляет около нескольких мс. В связи с этим время жизни регистрируемого уровня должно быть значительно больше.

При реализации квантового мемристора на захваченном ультрахолодном ионе $^{171}\text{Yb}^+$ набор уровней $|g\rangle$, $|e\rangle$ и $|a\rangle$ можно выбрать несколькими способами. При первом способе определения уровней, в качестве $|g\rangle$ и $|e\rangle$ уровней могут служить сверхтонкие подуровни основного состояния $^2S_{1/2}(F=0)$ и $^2S_{1/2}(F=1)$ соответственно, разница энергий между этими состояниями составляет 12.6 ГГц при нулевом приложенном магнитном поле. При этом единственным путем распада состояния $^2S_{1/2}(F=1)$ является магнитодипольный переход в состояние $^2S_{1/2}(F=0)$. При такой разности энергий скорость спонтанной эмиссии на этом переходе практически равна нулю [26], что позволяет задать период осцилляций Раби T_1 , необходимый для выполнения условия (1). В качестве состояния $|a\rangle$ может выступить более короткоживущее состояние $^2D_{3/2}(F=2)$, которое за время порядка 50 мс распадается в состояние $^2S_{1/2}$. На рисунке 1 такой набор уровней и соответствующие переходы отмечены синим цветом.

При втором способе определения, сверхтонкие подуровни уровня $^2F_{7/2}$ можно определить в качестве $|g\rangle$ и $|e\rangle$, соответственно [10]. Разность энер-

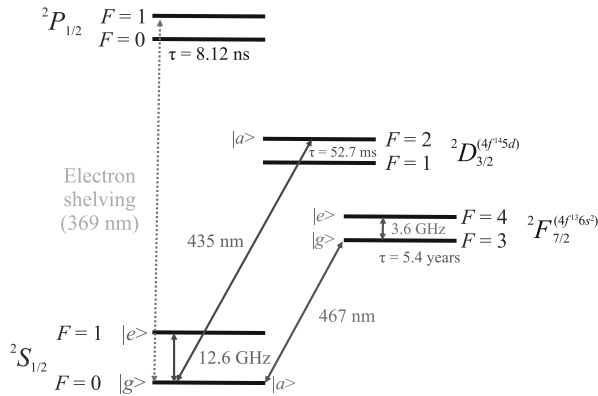


Рис. 1. (Цветной онлайн) Частичная схема электронных уровней иона $^{171}\text{Yb}^+$ (не в масштабе). Электрический дипольный переход $^2S_{1/2} \rightarrow ^2P_{1/2}$ ($E1$) на длине волны 369 нм используется для доплеровского охлаждения и регистрации населенности основного состояния иона методом МКС. Переход между уровнями $^2S_{1/2}(F=0)$ ($|g\rangle$) и $^2D_{3/2}(F=2)$ ($|a\rangle$) и переход между подуровнями сверхтонкой структуры $^2S_{1/2}(F=0)$ и $^2S_{1/2}(F=1)$ ($|e\rangle$) основного состояния могут использоваться для реализации первого квантового мемристора на одиночном ионе (уровни и переходы выделены синим цветом). Переход между подуровнями сверхтонкой структуры $^2F_{7/2}(F=3)$ ($|g\rangle$) и $^2F_{7/2}(F=4)$ ($|e\rangle$) и переход между уровнями $^2F_{7/2}(F=3)$ и $^2S_{1/2}(F=0)$ ($|a\rangle$) могут использоваться для реализации второго квантового мемристора на одиночном ионе (уровни и переходы выделены красным цветом)

гий между этими состояниями составляет 3.6 ГГц. Уровень $|g\rangle$ может быть первоначально заселен, например, π -импульсом из основного состояния. Чтобы возбудить движение населенностей уровней $|g\rangle$ и $|e\rangle$ (магнитно-дипольный переход), можно использовать радиочастотные импульсы на частоте 3.6 ГГц. Единственным каналом распада состояния $^2F_{7/2}(F=3)$ является октупольный переход в основное состояние $^2S_{1/2}(F=0)$. Скорость спонтанного излучения на этом переходе практически равна нулю (время жизни равно 5.4 года), поэтому и в данном случае есть возможность произвольно установить частоту колебаний Раби Ω , необходимую для выполнения условия (1). В свою очередь, основное состояние $^2S_{1/2}$ может быть выбрано в качестве состояния $|a\rangle$. Его населенность может быть легко обнаружена с помощью МКС. Особенностью предложенной схемы является то, что уровень $|a\rangle$ – основное состояние иона, – имеет меньшую энергию по сравнению с $|g\rangle$. Вместе с тем, большое время жизни уровня $|g\rangle$ (которое существенно превышает время эксперимента), позволяет надеяться на успешную реализацию данного способа определения уровней квантового мемристора. На ри-

сунке 1 набор уровней и переходы, соответствующие второму способу определения квантового мемристора, отмечены красным цветом.

Динамика населенности выделенных уровней под действием двух лазерных импульсов. Чтобы изучить влияние некоторых параметров лазерного импульса на мемристивные характеристики предложенного объекта, было проведено моделирование динамики населенностей уровней трехуровневой системы при воздействии последовательности резонансных лазерных импульсов. Для этого была использована система уравнений для амплитуд населенностей (a) выделенных уровней атома, который взаимодействует с двумя резонансными лазерными полями. Такая процедура, описанная в [28], в отсутствии спонтанной релаксации позволяет рассчитать динамику населенности уровней атома для всех типов трехуровневых схем (Λ – схемы, каскадные схемы и др.). Система уравнений для амплитуд населенностей уровней, соответствующих обоим схемам реализации квантового мемристора (см. рис. 1) имеет вид:

$$\begin{aligned}\dot{a}_{|g\rangle} &= i\Omega^* e^{-\left(\frac{t-t_{01}}{\tau_1}\right)^2} a_{|e\rangle} + i\tilde{\Omega}^* e^{-\left(\frac{t-t_{02}}{\tau_2}\right)^2} a_{|a\rangle}, \\ \dot{a}_{|e\rangle} &= i\Omega e^{-\left(\frac{t-t_{01}}{\tau_1}\right)^2} a_{|g\rangle}, \\ \dot{a}_{|a\rangle} &= i\tilde{\Omega} e^{-\left(\frac{t-t_{02}}{\tau_2}\right)^2} a_{|g\rangle},\end{aligned}\quad (2)$$

где $t_{02} - t_{01}$ – временная задержка между импульсами, $\tau_{1,2}$ – длительности лазерных импульсов. Расчеты проводились для значений частот Раби, длительностей, временных задержек, представленных в относительных безразмерных единицах. В начальный момент времени населен уровень $|g\rangle$. В первой реализации квантового мемристора (синие уровни на рис. 1) это выполняется автоматически, так как $|g\rangle$ – основное состояние, а во второй схеме – это достигается предварительным действием π -импульса, переводящим населенность из основного состояния в $|g\rangle$.

С использованием этих формул могут быть рассчитаны зависимости y от x , которые имеют вид гистерезиса [10]. Конкретный вид зависит от параметров лазеров, используемых для возбуждения осцилляций Раби.

На рисунке 2а представлен расчет $y(x)$, выполненный для первого способа определения уровней квантового мемристора (обозначенных синим цветом на рис. 1). Расчет проведен для следующих значений параметров системы уравнений (2): $\Omega = 0.0745$, $\tilde{\Omega} = 0.16$, $\tau_1 = 50$, $\tau_2 = 0.5$, $t_{02} - t_{01} = 20$. На рисунке 2b представлен расчет $y(x)$ при следующих зна-

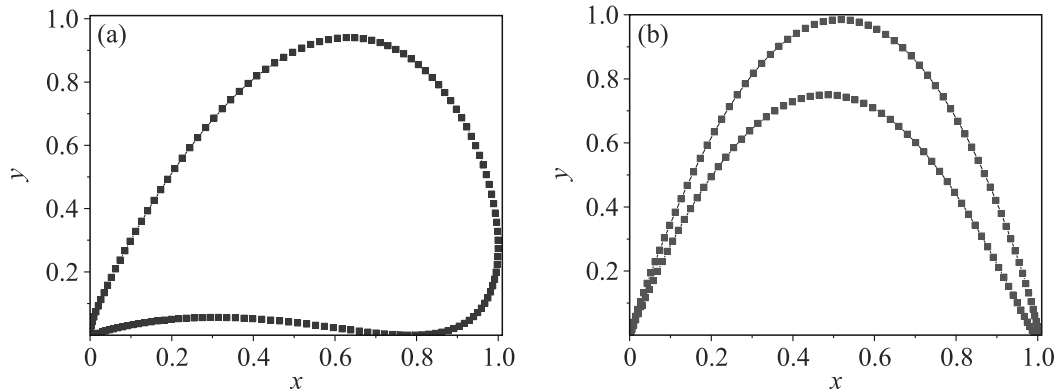


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Зависимость y (населенность уровня $|g\rangle$) после воздействия двух резонансных полей от x (населенность уровня $|g\rangle$) после воздействия одного резонансного поля, но до действия второго резонансного поля), рассчитанная для первого способа определения уровней при следующих значениях параметров: $\Omega = 0.0745$, $\tilde{\Omega} = 0.016$; (б) – зависимость y от x , рассчитанная для второго способа определения уровней при следующих значениях параметров: $\Omega = 0.0755$, $\tilde{\Omega} = 0.06$. Остальные параметры расчетов имеют следующие значения: $\tau_1 = 50$, $\tau_2 = 0.5$, $t_{02} - t_{01} = 20$

чениях параметров: $\Omega = 0.0755$, $\tilde{\Omega} = 0.06$, $\tau_1 = 50$, $\tau_2 = 0.5$, $t_{02} - t_{01} = 20$ для второго способа определения уровней в ионе $^{171}\text{Yb}^+$ (обозначенных красным цветом на рис. 1). В обоих случаях прослеживается характерная для мемристоров гистерезисная зависимость выходного сигнала от входного.

Заключение. В рамках данной работы предложены две схемы уровней ионов $^{171}\text{Yb}^+$, которые являются подходящими и удобными для экспериментальной реализации квантового мемристора на основе ультрахолодных ионов, захваченных в ловушки Пауля. Наличие двух схем уровней на одном ионе с существенно различающимися друг от друга возбуждающими резонансными частотами позволяет предложить схему связанных квантовых мемристоров на одиночном ионе, когда последовательное действие резонансных полей позволяет передавать состояние от мемристора к мемристор. Кроме того, в предложенных двух схемах задействуется один общий уровень $^2S_{1/2}(F=0)$, что позволяет проводить обучение таких систем. Таким образом, на одном ионе реализуется два слоя мемристоров. Наличие двух и более групп уровней на одном ионе с предложенной ранее в [10] схемой передачи информации по цепочке связанных низкочастотной колебательной модой центра масс ультрахолодных ионов позволяет создавать многослойные квантовые персептроны, которые являются основой нейронных сетей.

Финансирование работы. Работа выполнена при финансовой поддержке в рамках Междисциплинарных научно-образовательных школ Московского университета (соглашение # 23-Ш06-07).

Конфликт интересов. Авторы подтверждают отсутствие конфликта интересов.

1. A. N. Matsukatova, A. Yu. Vdovichenko, T. D. Patsaev, P. A. Forsh, P. K. Kashkarov, V. A. Demin, and A. V. Emelyanov, *Nano Res.* **16**, 3207 (2023).
2. L. Chua, *IEEE Trans. Circuit Theory* **18**, 507 (1971).
3. P. Pfeifer, I. L. Egusquiza, M. Di Ventra, M. Sanz, and E. Solano, *Sci. Rep.* **6**, 29507 (2016).
4. M. Sanz, L. Lamata, and E. Solano, *APL Photonics* **3**(8), 080801 (2018).
5. T. Gonzalez-Raya, J. M. Lukens, L. C. Céleri, and M. Sanz, *Materials* **13**, 864 (2020).
6. S. N. Shevchenko, Y. V. Pershin, and F. Nori, *Phys. Rev. Appl.* **6**, 014006 (2016).
7. S. N. Shevchenko and D. S. Karpov, *Phys. Rev. Appl.* **10**, 014013 (2018).
8. S. Peotta and M. Di Ventra, *Phys. Rev. Appl.* **2**, 034011 (2014).
9. J. Salmilehto, F. Deppe, M. Di Ventra, M. Sanz, and E. Solano, *Sci. Rep.* **7**(1), 42044 (2017).
10. S. Stremoukhov, P. Forsh, K. Khabarova, and N. Kolachevsky, *Entropy* **25**, 1134 (2023).
11. J.-L. Tang, G. A. Barrios, E. Solano, and F. Albarran-Arriagada, *Entropy* **25**, 756 (2023).
12. A. Norambuena, F. Torres, M. Di Ventra, and R. Coto, *Phys. Rev. Appl.* **17**, 024056 (2022).
13. M. Spagnolo, J. Morris, S. Piacentini, M. Antesberger, F. Massa, A. Crespi, F. Ceccarelli, R. Osellame, and P. Walther, *Nature Photon.* **16**(4), 318 (2022).
14. J. Gao, X.-W. Wang, W.-H. Zhou, Z.-Q. Jiao, R.-J. Ren, Y.-X. Fu, L.-F. Qiao, X.-Y. Xu, C.-N. Zhang, X.-L. Pang, H. Li, Y. Wang, and X.-M. Jin, *Chip* **1**(2), 100007 (2022).
15. C. Hernani-Morales, G. Alvarado, F. Albarran-Arriagada, Y. Vives-Gilabert, E. Solano, and J. D. Martin-Guerrero, *arXiv:2309.05062v1* (2023).
16. Д. Бауместер, А. Экерт, А. Цайлингер, *Физика квантовой информации*, Постмаркет, М. (2002).

17. W. Nagourney, J. Sandberg, and H. Dehmelt, Phys. Rev. Lett. **56**, 2797 (1986).
18. Th. Sauter, W. Neuhauser, R. Blatt, and P. E. Toschek, Phys. Rev. Lett. **57**, 1696 (1986).
19. J. C. Bergquist, R. G. Hulet, W. M. Itano, and D. J. Wineland, Phys. Rev. Lett. **57**, 1699 (1986).
20. F. Caravelli and J. P. Carbajal, Technologies **6**, 118 (2018).
21. T. W. Hansch and A. L. Schawlow, Opt. Commun. **13**(1), 68 (1975).
22. W. M. Itano, J. C. Bergquist, J. J. Bollinger, and D. J. Wineland, Phys. Scr. **59**, 106 (1995).
23. H. G. Dehmelt, Nature **262**, 777 (1976).
24. G. Morigi, J. Eschner, and C. H. Keitel, Phys. Rev. Lett. **85**, 4458 (2000).
25. M. Roghani and H. Helm, Phys. Rev. A **77**, 43418 (2008).
26. I. Semerikov, I. Zalivako, A. Borisenko, K. Khabarova, and N. Kolachevsky, J. Russ. Laser Res. **39**, 568 (2018).
27. L. A. Akopyan, I. V. Zalivako, K. E. Lakhmanskiy, K. Yu. Khabarova, and N. N. Kolachevsky, JETP Lett. **112**(9), 585 (2020).
28. Б. Д. Агапьев, М. Б. Горный, Б. Г. Матисов, Ю. В. Рождественский, УФН **163**(9), 1 (1993).

Спиновая накачка из $\text{Lu}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$

Д. А. Волков^{a,b}, Д. А. Габриелян^{a,b}, А. А. Матвеев^{a,c1)}, А. Р. Сафин^{a,b}, Д. В. Калябин^{a,e}, А. А. Хафизов^d,
М. Н. Маркелова^d, А. Р. Кауль^d, С. А. Никитов^{a,c,f}

^aИнститут радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН, 125009 Москва, Россия

^bНациональный исследовательский университет “МЭИ”, 111250 Москва, Россия

^cМосковский физико-технический институт, 141701 Долгопрудный, Россия

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

^eНациональный исследовательский университет “ВШЭ”, 109028 Москва, Россия

^fЛаборатория “Магнитные метаматериалы”, Саратовский государственный университет, 410012 Саратов, Россия

Поступила в редакцию 20 декабря 2023 г.

После переработки 19 января 2024 г.

Принята к публикации 22 января 2024 г.

В данной работе теоретически и экспериментально исследуется микроволновая спиновая накачка из ферромагнитного железо-лютециевого граната ($\text{Lu}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$). Преобразование прецессии вектора намагниченности, возбуждаемой переменным магнитным микроволновым полем, в постоянное напряжение, происходит благодаря обратному спиновому эффекту Холла в гетероструктуре железо-лютециевый гранат / тяжелый металл ($\text{Lu}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}/\text{Pt}$). В проведенных экспериментах внешнее магнитное поле изменялось от 0 до 6 кЭ, что позволило перестраивать резонансную частоту в широких пределах. Чувствительность данной гетероструктуры в эксперименте составила 8.2 мкВ/Вт. Смена знака постоянного напряжения при изменении направления магнитного поля подтверждает возникновение спинового тока в гетероструктуре $\text{Lu}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}/\text{Pt}$. Результаты проведенных исследований вносят большой вклад в понимание физики спиновой накачки и могут быть полезны в разработке новых высокочувствительных перестраиваемых спинтронных устройств.

DOI: 10.31857/S1234567824050057, EDN: FGUAOI

Для создания устройств передачи, приема и обработки информации нового поколения может использоваться спиновая степень свободы электронов [1–4]. В таких устройствах ключевую роль будет играть не ток зарядов, вызывающий джоулев нагрев, а ток спинов, лишенный этого недостатка [5]. В магнитных материалах одним из наиболее популярных методов для возбуждения спинового тока является спиновая накачка [6, 7]. Спиновая накачка представляет собой процесс передачи спинового углового момента от ферромагнитных материалов к немагнитным, посредством интерфейсных взаимодействий [8, 9]. Это явление, обусловленное уникальными квантово-механическими свойствами спинов электронов, открывает новые возможности для исследования фундаментальных вопросов взаимодействия спина и заряда, а также разработки инновационных технологий в области информационных носителей [10–12]. Экспериментальное наблюдение спи-

новой накачки обычно основано на достижении ферромагнитного резонанса (ФМР), где под воздействием внешнего магнитного поля происходит синхронизированная прецессия спиновых моментов в ферромагнетике [8, 10, 13]. Эта координированная динамика спинов, создает условия для переноса спина через ферромагнитно/немагнитный интерфейс. В результате, спиновый момент передается в немагнитный материал, возникает спиновый ток. Изучение такого тока в ферромагнитных материалах вызывает научный интерес [3]. Исследователи в области современной спинтроники сосредоточены на поиске материалов, подходящих по свойствам и характеристикам для практических приложений, таких как сверхвысокочастотные (СВЧ) устройства, детекторы слабых сигналов, магнитные запоминающие устройства (MRAM), спиновые логические устройства [2–4]. Экспериментальные методы изучения спиновой накачки, включая техники измерения спинового тока и спектров ферромагнитного резонанса, дают более полную картину для понимания этого явления

¹⁾e-mail: matveev.aa@phystech.edu

[14, 15]. Управление этим процессом может сыграть ключевую роль в разработке электронных устройств следующего поколения, объединяющих в себе классические и квантовые технологии [12, 16]. Одним из распространенных магнитных материалов является железо-иттриевый гранат, который хорошо зарекомендовал себя как для радиотехнических задач, так и для оптических применений, благодаря своим уникальным свойствам, таким как малые собственные потери и большая стрикция [17, 18]. В связи с этим возникает необходимость в исследовании различных структур на основе феррит-гранатов, для улучшения некоторых свойств и параметров разрабатываемых устройств. Целью данной работы является изучение спиновой накачки из $\text{Lu}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$. Для достижения этой цели были выращены методом химического осаждения из газовой фазы тонкие пленки $\text{Lu}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ и проведены эксперименты по наблюдению ферромагнитного резонанса и регистрации напряжения, вызванного обратным спиновым эффектом Холла. Для определения параметров гетероструктуры $\text{Lu}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}/\text{Pt}$ экспериментальные данные аппроксимировались теоретически полученными соотношениями.

Тонкая пленка $\text{Lu}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ выращивалась на монокристаллической подложке $\text{Gd}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$ (111) методом химического осаждения из паров металлоорганических соединений (*metal organic chemical vapor deposition* – MOCVD) [19, 20] на установке, схема которой представлена на рис. 1. Подложка $\text{Gd}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$ (111) была выбрана в связи с тем, что данный материал при комнатной температуре является парамагнитным и не вносит вклада в измерения. Небольшой постоянный магнит, колеблющийся в переменном магнитном поле, приводит в движение микроемкость (эпендорф), содержащую смесь твердых легко сублимирующихся металлоорганических соединений (прекурсоров), в результате чего микропорции последних подаются в нагретый испаритель. Образовавшийся пар прекурсоров потоком газа-носителя (Ar) переносится по горячим транспортным линиям в вертикальный кварцевый реактор, обогреваемый внешней печью. На подложке, расположенной в зоне максимальной температуры реактора, происходит окислительный термолиз прекурсоров с образованием оксидной пленки. В качестве прекурсоров использовались дивалентные метанаты $\text{Lu}(\text{thd})_3$ и $\text{Fe}(\text{thd})_3$ (Hthd – 2,2,6,6-тетраметилгептан-3,5-дион). Температуры горячих линий и реактора при осаждении составляли 240 и 970 °C, общее давление – 6 мбар, парциальное давление кислорода p_{O_2} – 3 мбар, скорость подачи прекурсоров – 2 мг/мин. После осаждения

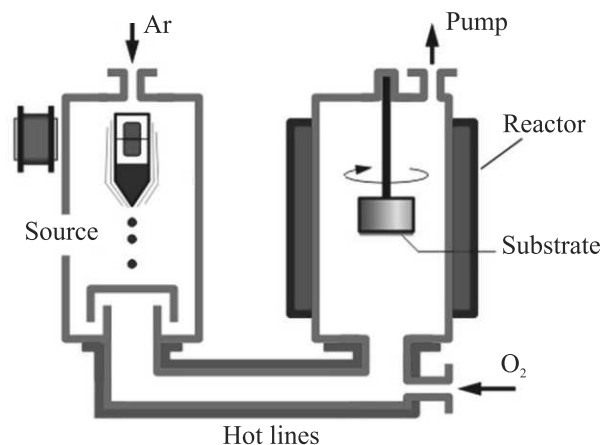


Рис. 1. (Цветной онлайн) Установка для получения тонких пленок методом химического осаждения из паров металлоорганических соединений

ния проводился отжиг в кислороде при температуре 970 °C в течение 20 мин.

По данным рентгеноспектрального микроанализа соотношение Fe/Lu в полученной пленке составило 1.7(3), что близко к $5/3 \approx 1.67$, которое соответствует гранату $\text{Lu}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$. Фазовый анализ и ориентация полученных пленок определялась из данных рентгеновского θ -2 θ -сканирования. Съемка в режиме θ -2 θ -сканирования проводилась на дифрактометре Rigaku SmartLab ($\text{CuK}\alpha$, вторичный графитовый монохроматор излучения) в интервале углов 5–80° с шагом 0.02°, время накопления сигнала – 1 с. Фазовый анализ проводился с использованием базы данных JCPDS. По данным рентгеновской дифракции (см. рис. 2) показано, что в пленке присутствуют пики от фазы $\text{Lu}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ и примеси $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ (содержание порядка 0.3%). Наличие единственного

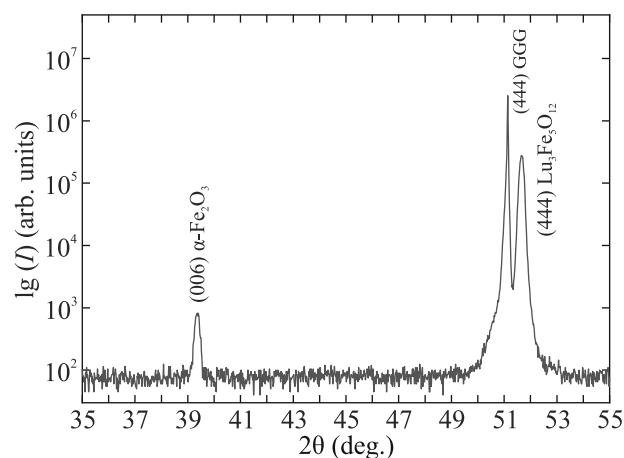


Рис. 2. (Цветной онлайн) θ -2 θ -рентгенограмма для пленки $\text{Lu}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ на подложке $\text{Gd}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$ (111)

рефлекса (444) от фазы железо-лутециевого граната однозначно подтверждает ориентированный рост $\text{Lu}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ на подложке $\text{Gd}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$ (111). Рассчитанное значение параметра кристаллической решетки для $\text{Lu}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ составило $12.25(1) \text{ \AA}$, что несколько меньше теоретического значения параметра для фазы $\text{Lu}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ ($12.284 \text{ \AA}$) и связано с упругой деформацией растущей пленки на подложке $\text{Gd}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$ (111) в виду различия их параметров ($a(\text{Gd}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}) = 12.383 \text{ \AA}$). Таким образом, полученные пленки могут быть использованы в экспериментах по измерению спектров ФМР, а для исследования спиновой накачки, на пленку $\text{Lu}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ был напылен тонкий слой платины, порядка 10 нм методом магнетронного распыления.

Для исследования спектров поглощения ФМР гетероструктуры $\text{Lu}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}/\text{Pt}$ была использована установка, схема которой представлена на рис. 3, на

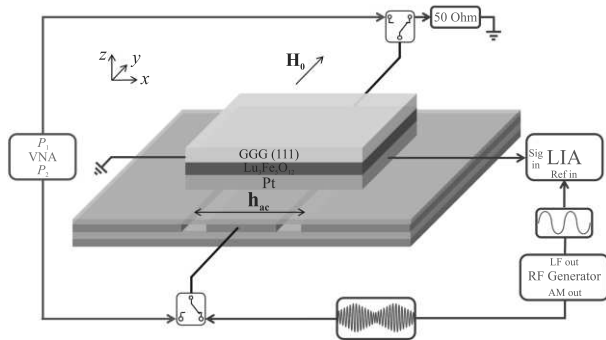


Рис. 3. (Цветной онлайн) Схема экспериментальной установки. Красным цветом показана схема измерения ФМР. Синим цветом показана схема измерения напряжения, образующегося в слое платины

основе векторного анализатора цепей (*vector network analyzer* – VNA). Микроволновый сигнал, генерируемый первым портом VNA, подавался на первый порт копланарного волновода. Ко второму порту копланарного волновода был подключен второй порт VNA, измеряющий мощность прошедшего СВЧ сигнала. Копланарный волновод был расположен между полюсами электромагнита планарного поля. Вектор постоянного магнитного поля $\mathbf{H}_0$, создаваемого электромагнитом, был перпендикулярен вектору переменного магнитного поля $\mathbf{h}_{ac}$, создаваемого копланарным волноводом. Измерялись мнимая и реальная части S_{21} параметра гетероструктуры $\text{Lu}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}/\text{Pt}$, расположенной на копланарном волновод. Параметр S_{21} характеризует отношение прошедшей мощности через копланарный волновод к мощности, действующей на его входе. В момент совпадения частоты ферромагнитного резонанса и частоты СВЧ сигнала, подаваемого на вход копланарного волновода, происходит поглощение мощности СВЧ сигнала, которое отчетливо показывает S_{21} параметр. На рисунке 4 показана частотная зависимость спектров фер-

ромагнитного резонанса и частоты СВЧ сигнала, подаваемого на вход копланарного волновода, происходит поглощение мощности СВЧ сигнала, которое отчетливо показывает S_{21} параметр. На рисунке 4 показана частотная зависимость спектров фер-

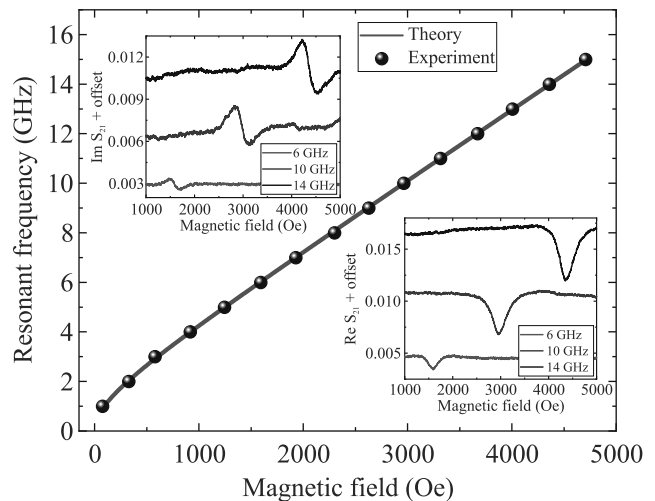


Рис. 4. (Цветной онлайн) Экспериментально полученная из спектров ФМР зависимость резонансной частоты от внешнего магнитного поля (черные точки) и аппроксимация формулой Киттеля (розовая линия). Вставки показывают зависимость мнимых и действительных частей S_{21} параметров от внешнего магнитного поля для разных частот, с постоянным смещением по оси ординат

ромагнитного резонанса от величины внешнего постоянного магнитного поля $\mathbf{H}_0$. На вставках рис. 4 показаны реальные и мнимые части S_{21} параметров спектров ФМР на различных частотах. Из полученных спектров ФМР отчетливо видно смещение резонансного поля при изменении частоты.

При воздействии СВЧ сигнала на гетероструктуру, в лутециевом гранате возбуждается однородная прецессия магнитного момента. За счет спиновой накачки, в ферромагнитном слое начинает протекать спиновый ток. Проведено экспериментальное исследование напряжения, вызванного обратным спиновым эффектом Холла (*Inverse spin Hall effect* – ISHE напряжение). ISHE напряжение возникает в слое платины гетероструктуры $\text{Lu}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}/\text{Pt}$ и обусловлено конверсией спинового тока в зарядовый, за счет высокого спин-орбитального взаимодействия платины. Для измерения этого напряжения был использован метод фазосинхронного детектирования (см. рис. 3). С генератора (RF Generator) подавался СВЧ сигнал с амплитудной модуляцией (AM) на первый порт копланарного волновода. Второй порт

копланарного волновода был подключен к согласованной нагрузке 50 Ом. Как и в случае измерения спектров ФМР, копланарный волновод был расположен между полюсами электромагнита планарного поля. На копланарном волноводе была расположена гетероструктура $\text{Lu}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}/\text{Pt}$, причем волновод был изолирован от гетероструктуры, из-за проводимости платинового слоя. На плате копланарного волновода находятся два контакта, не имеющих связи с СВЧ линией, предназначенные для вывода на них ISHE напряжения, возникающего в слое платины. Соединение этих контактов и слоя платины осуществлялось токопроводящим клеем на серебряной основе. Для измерения ISHE напряжения, использовался фазосинхронный усилитель (*lock-in amplifier* – LIA). На LIA подавался опорный сигнал с низкочастотного выхода генератора, синфазный с модулирующим сигналом. На измерительный вход LIA подавалось напряжение с контактов, расположенных на копланарном волноводе. Частота модуляции СВЧ сигнала составляла 9.777 кГц. На рисунке 5 показаны

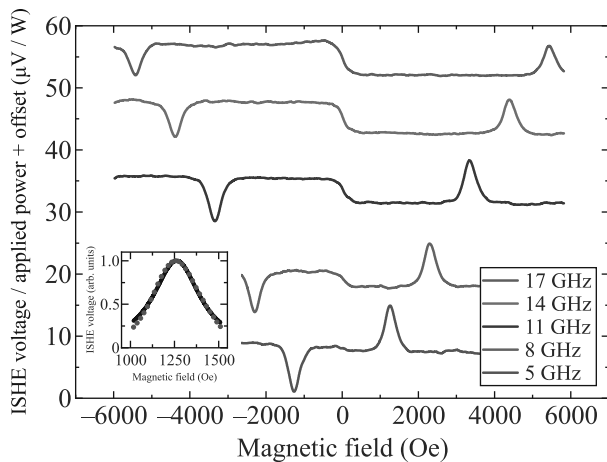


Рис. 5. (Цветной онлайн) Экспериментально полученные зависимости ISHE напряжения от внешнего магнитного поля для различных частот с постоянным смещением по оси ординат. Вставка показывает аппроксимацию экспериментальной зависимости ISHE напряжения (красные точки) теоретической кривой (черная линия) на частоте 5 ГГц

но измеренное ISHE напряжение, построенное с постоянным смещением по оси ординат, на различных частотах СВЧ сигнала. Как и в случае ФМР, пики полученного напряжения сдвигаются в большие резонансные поля с увеличением частоты СВЧ сигнала. При изменении направления внешнего магнитного поля на противоположное, видно изменение знака

измеренного напряжения, что подтверждает природу возникновения данного напряжения.

При проведении теоретического анализа использовалась система единиц СГС. Было показано [8, 21], что плотность тока, вызываемого спиновой накачкой, пропорциональна векторному произведению $\mathbf{j} \propto \mathbf{m} \times d\mathbf{m}/dt$. Для нахождения $\mathbf{j}$ можно решить уравнение Ландау-Лифшица относительно вектора намагниченности $\mathbf{m}$, нормированного на намагниченность насыщения M_s [4, 22]. Это уравнение имеет вид

$$\frac{d\mathbf{m}}{dt} = -\gamma \mathbf{m} \times \mathbf{H}_{\text{eff}} - \alpha \gamma \mathbf{m} \times [\mathbf{m} \times \mathbf{H}_{\text{eff}}], \quad (1)$$

где γ – гиромагнитное отношение, α – параметр затухания, $\mathbf{H}_{\text{eff}}$ – эффективное магнитное поле. Влияние спинового тока, возникающего на границе между ферромагнетиком и тяжелым металлом, может быть учтено в (1) как дополнительное затухание [8, 23]. В этом случае в уравнении (1) следует заменить α на эффективный параметр затухания $\alpha_{\text{eff}} = \alpha_G + \alpha_{\text{SP}}$, являющийся суммой константы Гильберта α_G [24, 25] и некоторой добавки α_{SP} , учитывающей протекание спинового тока. Эффективное магнитное поле определяется как вариационная производная магнитной энергии E

$$\mathbf{H}_{\text{eff}} = -\frac{1}{M_s} \frac{\delta E}{\delta \mathbf{m}}. \quad (2)$$

В приближении тонкой пленки объемную плотность магнитной энергии можно записать как

$$E_V = -M_s (\mathbf{H}_0 + \mathbf{h}_{\text{ac}}) \cdot \mathbf{m} + \frac{M_s}{2} M_{\text{eff}} (\mathbf{m} \cdot \mathbf{e}_z)^2, \quad (3)$$

где $\mathbf{H}_0 = (0, H_{0y}, 0)$ – внешнее постоянное магнитное поле, $\mathbf{h}_{\text{ac}} = (h_0 \cos(\Omega t), 0, 0)$ – переменное СВЧ магнитное поле с частотой Ω и амплитудой $h_0 > 0$, $M_{\text{eff}} = (4\pi M_s - H_p)$ – эффективная намагниченность. Второе слагаемое в (3) учитывает анизотропию формы и перпендикулярную магнитную анизотропию H_p [26]. Введем малый вектор $\mathbf{s}(t)$, описывающий отклонение вектора намагниченности от основного состояния $\mathbf{m}_0$, причем $(\mathbf{m}_0 \cdot \mathbf{s}) = 0$. Тогда

$$\mathbf{m}(t) = \mathbf{m}_0 + \mathbf{s}(t). \quad (4)$$

Поскольку $\mathbf{H}_0 = (0, H_{0y}, 0)$ то $\mathbf{m}_0 = (0, m_{0y}, 0)$ и $\mathbf{s}(t) = (s_x(t), 0, s_z(t))$. Для определенности будем считать, что $H_{0y} = H_0 > 0$ и $m_{0y} \approx 1$. Подставим (4) в (1), отбросим слагаемые выше первого порядка

малости по s и получим линеаризованное уравнение Ландау–Лифшица

$$\begin{pmatrix} \frac{ds_x}{dt} \\ \frac{ds_z}{dt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\alpha_{\text{eff}}\gamma H_0 & \gamma(H_0 + M_{\text{eff}}) \\ -\gamma H_0 & -\alpha_{\text{eff}}\gamma(H_0 + M_{\text{eff}}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_x \\ s_z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \alpha_{\text{eff}}\gamma h_0 \cos(\Omega t) \\ \gamma h_0 \cos(\Omega t) \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Решения (5) можно искать в виде

$$\begin{aligned} s_x &= s_1^x \cos(\Omega t) + s_2^x \sin(\Omega t), \\ s_z &= s_1^z \cos(\Omega t) + s_2^z \sin(\Omega t). \end{aligned} \quad (6)$$

Подстановка (6) в (5) дает возможность найти выражения для амплитуд $s_1^x, s_2^x, s_1^z, s_2^z$. Используя (6), найдем $\mathbf{j}$

$$\mathbf{j} = \kappa_j \begin{pmatrix} \Omega(s_2^z \cos(\Omega t) - s_1^z \sin(\Omega t)) \\ \Omega(s_1^z s_2^x - s_1^x s_2^z) \\ \Omega(s_2^z \cos(\Omega t) - s_1^z \sin(\Omega t)) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_x \\ j_y \\ j_z \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Здесь κ_j – коэффициент пропорциональности между j и $\mathbf{m} \times d\mathbf{m}/dt$. Компоненты j_x и j_z характеризуют отклик гетероструктуры на СВЧ сигнал на первой гармонике, а j_y – на нулевой гармонике. Поэтому контакты для снятия постоянного напряжения, вызываемого обратным спиновым эффектом Холла, располагались в плоскости, перпендикулярной оси OY (см. рис. 3). В этом случае снимаемое напряжение V окажется пропорционально $j_y = \Omega(s_1^z s_2^x - s_1^x s_2^z)$. Введем $\varkappa > 0$ коэффициент пропорциональности между V и j_y . Тогда можно записать

$$V = \varkappa \kappa_j \frac{\gamma^3 \Omega^2 (\alpha_{\text{eff}}^2 + 1) (H_0 + M_{\text{eff}}) h_0^2}{\Omega^4 + C_1 \Omega^2 + C_0}, \quad (8)$$

$$C_0 = \gamma^4 H_0^2 (\alpha_{\text{eff}}^2 + 1)^2 (H_0 + M_{\text{eff}})^2, \quad (9)$$

$$C_1 = 2\gamma^2 (1 - \alpha_{\text{eff}}^2) \left(\frac{M_{\text{eff}}^2 \alpha_{\text{eff}}^2}{2(1 - \alpha_{\text{eff}}^2)} + H_0 M_{\text{eff}} - H_0^2 \right). \quad (10)$$

Отметим, что если при выводе (8) предполагать, что $H_{0y} < 0, m_{0y} \approx -1$ то тогда, ISHE напряжение изменит знак, что соответствует экспериментальным результатам (см. рис. 5). Для того, чтобы найти резонансную частоту Ω_r достаточно продифференцировать (8) по Ω и учесть, что при $\Omega = \Omega_r$ достигается экстремум функции $V(\Omega)$. Получим

$$\Omega_r = \gamma \sqrt{H_0 (1 + \alpha_{\text{eff}}^2) (H_0 + M_{\text{eff}})}. \quad (11)$$

Если в выражении (11) положить равным нулю коэффициент затухания $\alpha_{\text{eff}} = 0$, то будет получена формула Киттеля для ФМР в тонкой магнитной пленке [27]. Решив (11) относительно внешнего магнитного поля, найдем выражение для резонансного поля H_r

$$H_r = -\frac{1}{2} M_{\text{eff}} + \frac{1}{2} \sqrt{M_{\text{eff}}^2 + \frac{4\Omega_r^2}{\gamma^2 (1 + \alpha_{\text{eff}}^2)}}. \quad (12)$$

Подстановка (11) в (8) даст возможность найти уравнение для определения резонансного ISHE напряжения. Получим

$$V_r = \frac{\varkappa \kappa_j \gamma (1 + \alpha_{\text{eff}}^2) \left(M_{\text{eff}} + \sqrt{M_{\text{eff}}^2 + \frac{4\Omega_r^2}{\gamma^2 (1 + \alpha_{\text{eff}}^2)}} \right)}{2\alpha_{\text{eff}} \left(M_{\text{eff}}^2 + \frac{4\Omega_r^2}{\gamma^2 (1 + \alpha_{\text{eff}}^2)} \right)} h_0^2. \quad (13)$$

Определить гиромагнитное отношение и эффективную намагниченность можно при аппроксимации зависимости резонансной частоты от H_0 , полученной в ФМР эксперименте (см. рис. 4), с помощью формулы (11) с учетом $\alpha_{\text{eff}} = 0$ (см. рис. 1). Гиромагнитное отношение оказалось равным $\gamma = 17.7 \text{ МГц/Э}$, а эффективная намагниченность $M_{\text{eff}} = 1223 \text{ Гс}$. Аппроксимация экспериментальных точек зависимости ISHE напряжения от внешнего магнитного поля для различных частот позволила определить параметр затухания $\alpha_{\text{eff}} = 0.089 \pm 0.007$. Для исключения необходимости знания $\varkappa$ подбор коэффициента α_{eff} производился в безразмерном масштабе (см. пример на вставке рис. 5). Коэффициент $\varkappa$ может быть определен при сравнении графика $V(H_0)$, построенного по формуле (8), с результатами эксперимента без обезразмеривания.

Получим выражение для чувствительности $K = dV/dP$, где P – входная СВЧ мощность. Для этого в выражении (13) нужно учесть связь мощности и амплитуды СВЧ поля $P = cQh_0^2/2$, где c – скорость света, Q – площадь образца. Тогда можно записать

$$V_r = K \cdot P. \quad (14)$$

Здесь

$$K = \frac{\varkappa \kappa_j \gamma (1 + \alpha_{\text{eff}}^2) \left(M_{\text{eff}} + \sqrt{M_{\text{eff}}^2 + \frac{4\Omega_r^2}{\gamma^2 (1 + \alpha_{\text{eff}}^2)}} \right)}{\alpha_{\text{eff}} c Q \left(M_{\text{eff}}^2 + \frac{4\Omega_r^2}{\gamma^2 (1 + \alpha_{\text{eff}}^2)} \right)}. \quad (15)$$

На рисунке 6 представлена зависимость ISHE напряжения от постоянного внешнего магнитного по-

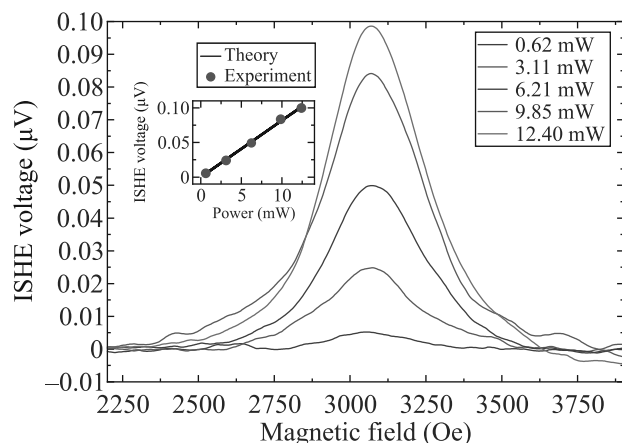


Рис. 6. (Цветной онлайн) Экспериментально полученные зависимости ISHE напряжения от внешнего магнитного поля для разных СВЧ мощностей на частоте 10 ГГц. На вставке сплошной линией изображена теоретическая зависимость ISHE напряжения от СВЧ мощности, а красными точками показаны экспериментальные результаты

ля H_0 при различных реальных СВЧ мощностях P . На вставке рис. 6 показана чувствительность структуры, т.е. зависимость выпрямленного напряжения от реальной мощности, действующей на образец во время измерения. Чувствительность K представляет собой тангенс угла наклона $V_r(P)$. При аппроксимации экспериментальных результатов формулой (14) было установлено, что $K = 8.2$ мкВ/Вт.

Было продемонстрировано как теоретически, так и экспериментально, что $\text{Lu}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ может быть использован в качестве чувствительного элемента для обнаружения линейно поляризованной радиочастотной волны в пределах десятков ГГц. Были изучены спектры ФМР структуры. Показано, что теоретическая и экспериментальная зависимости резонансной частоты от магнитного поля согласуются. Кроме того, были измерены ISHE напряжения на гетероструктуре $\text{Lu}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}/\text{Pt}$ при разных частотах СВЧ воздействия. Полученные экспериментально данные описаны в рамках используемой теоретической модели. Было показано, что при увеличении внешнего магнитного поля, резонансная частота увеличивается, что согласуется с теорией (11). Зависимость ISHE напряжения, выпрямленного гетероструктурой $\text{Lu}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}/\text{Pt}$, от магнитного поля показывает, что увеличение мощности подаваемого радиочастотного сигнала увеличивает амплитуду резонансного пика. При аппроксимации экспериментальных данных теоретическими зависимостями были получены следующие параметры $\text{Lu}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}/\text{Pt}$. Чувствительность 8.2 мкВ/Вт, гиромагнитное отношение 17.7 МГц/Э

и эффективная намагниченность 1223 Гс. Дальнейшие улучшения технологии изготовления пленок лютециевого граната, такие как избавление от побочных примесей гематита и подбор оптимальных параметров химического осаждения, способствуют созданию образцов с узкой шириной линии ФМР и более интенсивным откликом спиновой накачки исследуемой гетероструктуры. Данные улучшения помогут повысить чувствительность, что позволит использовать на практике $\text{Lu}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}/\text{Pt}$ в качестве чувствительного элемента для микроволновых детекторов с возможностью селективной перестройки частоты при помощи постоянного магнитного поля.

Финансирование работы. Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда # 23-79-00016.

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

1. C. Sun and J. Linder, Phys. Rev. B **107**, 144504 (2023).
2. N. Locatelli, V. Cros and J. Grollier, Nature Mater. **13**, 11 (2014).
3. Q. Shao, P. Li, L. Liu et al. (Collaboration), IEEE Trans. Magn. **57**(7), 1 (2021).
4. С. А. Никитов, А. Р. Сафин, Д. В. Калябин, А. В. Садовников, Е. Н. Бегинин, М. В. Логунов, М. А. Морозова, С. А. Одинцов, С. А. Осокин, А. Ю. Шаравская, Ю. П. Шараевский, А. И. Кирилук, УФН **190**(10), 1009 (2020).
5. P. Omelchenko, E. Montoya, E. Girt, and B. Heinrich, Phys. Rev. Lett. **127**, 137201, (2021).
6. K. Ando, S. Takahashi, J. Ieda, Y. Kajiwara, H. Nakayama, T. Yoshino, K. Harii, Y. Fujikawa, M. Matsuo, S. Maekawa, and E. Saitoh, J. Appl. Phys. **109**(10), 103913 (2011).
7. S. Martin-Rio, C. Frontera, A. Pomar, L. Balcells, and B. Martinez, Sci. Rep. **12**, 224 (2022).
8. Y. Tserkovnyak, A. Brataas, and G. Bauer, Phys. Rev. Lett. **88**, 117601 (2002).
9. Y. Kajiwara, K. Harii, S. Takahashi, J. Ohe, K. Uchida, M. Mizuguchi, H. Umezawa, H. Kawai, K. Ando, K. Takanashi, S. Maekawa, and E. Saitoh, Nature **464**, 262 (2010).
10. Y. Tserkovnyak and H. Ochoa Phys. Rev. B **96**, 100402(R) (2017).
11. A. R. Moura, Phys. Rev. B **106**, 054313 (2022).
12. S. Wolf, D. Awschalom, R. Buhrman, J. Daughton, S. Molnar, M. Roukes, A. Chtchelkanova, and D. Treger, Science **294**, 1488, (2001).
13. L. Zhu, D. Ralph, and R. Buhrman, Phys. Rev. Lett. **123**, 057203, (2019).
14. V. Atsarkin, V. Demidov, and T. A. Shaikhulov, JETP **130**, 228 (2020).

15. F. Yang and P. Hammel, J. Phys. D: Appl. Phys. **51**, 253001 (2018).
16. I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma, Rev. Mod. Phys. **76**, 323, (2004).
17. L. Liu, Y. Li, Y. Liu, T. Feng, J. Xu, X. Wang, D. Wu, P. Gao, and J. Li, Phys. Rev. B **102**, 014411, (2020).
18. C. Jermain, H. Paik, S. Aradhya, R. Buhrman, D. Schlom, and D. Ralph, Appl. Phys. Lett. **109**(19), 192408 (2016).
19. A.R. Kaul, O.Y. Gorbenko, A.N. Botev, and L.I. Burova, Superlattices and Microstructures **38**(4–6), 272 (2005).
20. Ю.П. Сухоруков, Е.А. Ганьшина, А.Р. Кауль, О.Ю. Горбенко, Н.Н. Лошкарева, А.В. Телегин, М.С. Картавцева, А.Н. Виноградов, ЖТФ **78**(6), 43 (2008).
21. T. Chiba, M. Schreier, G. Bauer, and S. Takahashi, J. Appl. Phys. **117**(17), 17715 (2015).
22. A. Slavin and V. Tiberkevich, IEEE Trans. Magn. **44**, 1916 (2008).
23. B. Heinrich, C. Burrowes, E. Montoya, B. Kardasz, E. Girt, Y. Song, Y. Sun, and M. Wu, Phys. Rev. Lett. **107**, 066604 (2011).
24. T. Shaikhulov and G. Ovsyannikov, Phys. Solid State **60**, 2231 (2018).
25. T. Gilbert, IEEE Trans. Magn. **40**, 3443 (2004).
26. B. Tudu and A. Tiwari, Vacuum **146**, 329 (2017).
27. В.Г. Шавров, В.И. Щеглов, *Ферромагнитный резонанс в условиях ориентационного перехода*, Физматлит, М. (2018).

Гигантское параметрическое усиление обратного эффекта Коттона–Мутона в антиферромагнитных кристаллах

А. К. Звездин^{a,b,c,1)}, Р. М. Дубровин^{d,e,1)}, А. В. Кимель^f

^aИнститут общей физики им. А. М. Прохорова РАН, 119991 Москва, Россия

^bФизический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

^cООО “Новые спинтронные технологии”, 121205 Москва, Россия

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

^eНижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского, 603022 Н. Новгород, Россия

^fRadboud University, Institute for Molecules and Materials, 6525AJ Nijmegen, The Netherlands

Поступила в редакцию 11 декабря 2023 г.

После переработки 19 января 2024 г.

Принята к публикации 22 января 2024 г.

В работе проведен теоретический анализ взаимодействия света со спинами в гейзенберговском антиферромагнетике с пренебрежимо малой магнитной анизотропией, как в случае RbMnF_3 . В частности, проведено моделирование эксперимента оптической накачки и зондирования, где под действием коротких лазерных импульсов накачки в антиферромагнетике возбуждаются когерентные терагерцовые магноны, которые детектируются задержанным во времени относительно импульса накачки импульсом зондирования. Показано, что вблизи параметрического резонанса, т.е. в области параметрической неустойчивости, происходит гигантское усиление интенсивности возбуждения терагерцовых магнонов под влиянием обратного эффекта Коттона–Мутона.

DOI: 10.31857/S1234567824050069, EDN: FKYCAE

1. Введение. Эффективная генерация когерентных спиновых волн в антиферромагнетиках является актуальной задачей для современной спинтроники и магноники. Короткие лазерные импульсы, длительностью около 100 фс и менее, являются одним из наиболее эффективных способов генерации когерентных магнонов в широком диапазоне частот от гигагерц до терагерц. Наиболее универсальный механизм возбуждения когерентных магнонов лазерными импульсами основан на обратных магнитооптических (оптомагнитных) эффектах Фарадея и Коттона–Мутона, где поляризованный импульс света создает в магнетике импульс эффективного магнитного поля и таким образом индуцирует однородные спиновые осцилляции, которые соответствуют когерентным магнонам в центре зоны Бриллюэна [1]. Максимальная частота магнона, который может возбуждаться благодаря этим механизмам, равна максимально возможной разнице частот в Фурье спектре импульса эффективного магнитного поля.

Параметрическое возбуждение магнонов – принципиально иной механизм. При параметрическом

возбуждении накачка с частотой ω_p возбуждает моды с половинной частотой $\omega_p/2$. Такое возбуждение является достаточно эффективным механизмом генерации когерентных магнонов [2, 3] и фононов [4–6], а также “тихих” (*silent*) фононов, которые иначе не взаимодействуют со светом [7]. Теория параметрических эффектов в ферромагнетиках разработана достаточно подробно [8–12]. Параметрическому возбуждению спиновых волн в антиферромагнетиках также был посвящен ряд работ [2, 13–18]. Интересно, что условие параметрической накачки позволяет парами возбуждать магноны с не равными нулю, но противоположными по знаку волновыми векторами. В результате, в отличие от оптомагнитных эффектов Фарадея и Коттона–Мутона, параметрическая накачка позволяет возбуждать неоднородные спиновые осцилляции, которые соответствуют когерентным магнонам в глубине зоны Бриллюэна.

Возможность возбуждать когерентные магноны с ненулевым волновым вектором может привести к существенным отличиям в описании спиновой динамики. Обычно, антиферромагнетик описывается как два антиферромагнитно связанных ферромагнети-

¹⁾e-mail: zvezdin@gmail.com; dubrovin@mail.ioffe.ru

ка с намагниченностями $\mathbf{M}_1$ и $\mathbf{M}_2$. Тогда магнитный порядок можно описать используя антиферромагнитный вектор $\mathbf{L} = \mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_2$ и намагниченность $\mathbf{M} = \mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2$ ($\mathbf{M} = 0$). Спиновая динамика, которая соответствует магнонам в центре зоны Бриллюэна и имеет малую амплитуду, успешно описывается в терминах $\mathbf{L}$ в приближении $|\mathbf{L}| = \text{const}$. Увеличение волнового вектора увеличивает частоту предельно возможных спиновых осцилляций, которые определяются величиной обменного взаимодействия. Модуляция обменного взаимодействия электрическим полем лазерного импульса обеспечивает условия параметрической неустойчивости, тогда как обратный эффект Коттона–Мутона создает внешний вращающий момент, действующий на спины, который приводит к скосу магнитных подрешеток $\mathbf{M}_1$ и $\mathbf{M}_2$ из положения равновесия. Это означает, что $|\mathbf{L}|$ больше нельзя считать постоянной величиной. При этом (т.е. при $|\mathbf{L}| \neq \text{const}$) размерность системы нелинейных уравнений спиновой динамики антиферромагнетика увеличивается в два раза: с 3 до 6 или с 2 до 4 при использовании сферических координат. Таким образом, эта работа посвящена теоретическому анализу спиновой динамики с $|\mathbf{L}| \neq \text{const}$, которая индуцируется коротким лазерным импульсом в результате параметрического возбуждения магнонов с волновым вектором, отличным от нуля.

2. Двухподрешеточный гейзенберговский антиферромагнетик. Рассмотрим двухподрешеточный антиферромагнитный кристалл кубической симметрии (точечная группа $m\bar{3}m$), основной гамильтониан которого можно представить в виде

$$H_0 = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j + K \sum_i (S_y^2 S_z^2 + S_x^2 S_z^2 + S_x^2 S_y^2), \quad (1)$$

где $J > 0$ – энергия обменного взаимодействия, $K < 0$ – энергия магнитной анизотропии, которая в случае RbMnF_3 пренебрежимо мала [19], S – спин (для RbMnF_3 $S = 5/2$).

В сферической системе координат намагниченности подрешеток антиферромагнетика определяются как $\mathbf{M}_i = M(\sin \vartheta_i \cos \varphi_i, \sin \vartheta_i \sin \varphi_i, \cos \vartheta_i)$ где $i = 1, 2$ обозначают противоположно направленные магнитные подрешетки, $\vartheta \in [0, \pi]$ – полярный угол, отсчитываемый от оси z , а $\varphi \in [0, 2\pi]$ – азимутальный угол в плоскости xy , отсчитываемый от оси x , как показано на рис. 1а. Минимизация гамильтониана (1) определяет основное состояние, для которого сферические углы имеют значения $\vartheta_1^{(0)} = \arccos(1/\sqrt{3})$, $\vartheta_2^{(0)} = \pi - \arccos(1/\sqrt{3})$ и $\varphi_1^{(0)} = \pi/4$, $\varphi_2^{(0)} = 3\pi/4$.

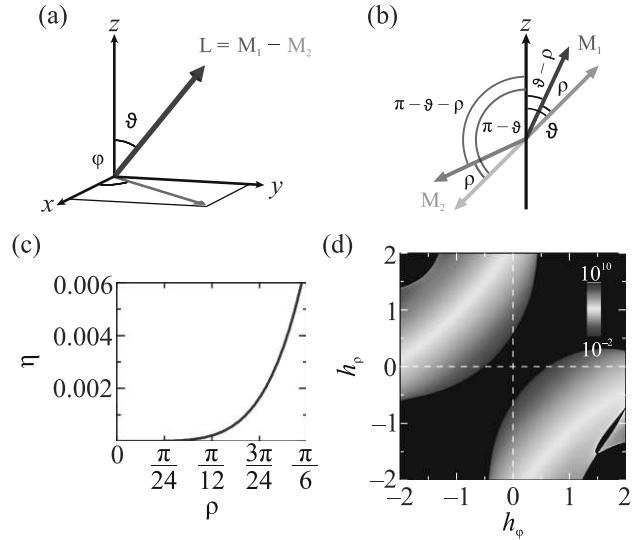


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Антиферромагнитный вектор $\mathbf{L}$ направленный вдоль оси $[111]$ в сферической системе координат, и его проекция на плоскость xy . (б) – Скос противоположно направленных намагниченностей подрешеток $\mathbf{M}_{1,2}$ (canting) под углом ρ относительно оси z . (с) – Зависимость коэффициента ортогональности $\eta = |\langle \mathbf{n}_j \mathbf{n}_{j+\delta} \rangle| = \left| \left(\frac{-\rho^2 - \beta^2 \sin^2 \vartheta}{2} \right)^S \right| \ll 1$ от угла скоса подрешеток ρ при $\beta = 0$. (д) – Цветовая карта, показывающая параметрическое усиление обратного эффекта Коттона–Мутона в зависимости от параметрических коэффициентов h_φ и h_ρ системы уравнений (12). Граница черной области соответствует порогу параметрической неустойчивости

3. Светоиндуцированная спиновая динамика в терминах спиновых корреляторов. В неравновесном состоянии под действием коротких лазерных импульсов, распространяющихся в антиферромагнитном кристалле вдоль оси z , $\mathbf{E} = E_0(\cos \alpha, \sin \alpha, 0)$, где α – угол в плоскости xy относительно оси x , коллинеарные намагниченности подрешеток скашиваются в результате динамической модуляции обменного взаимодействия электрическим полем волны. Далее мы будем рассматривать углы подрешеток

$$\begin{aligned} \vartheta_1 &= \vartheta - \rho, \\ \vartheta_2 &= \pi - \vartheta - \rho, \\ \varphi_1 &= \varphi + \beta, \\ \varphi_2 &= \varphi + \pi - \beta, \end{aligned} \quad (2)$$

скошенные на небольшие углы $\rho \ll 1$ и $\beta \ll 1$. Ниже будет показано, что эллиптичность, наведенная импульсом накачки, чувствительна только к углу ρ , который показан на рис. 1б.

Для описания спиновой динамики нам потребуется энергия взаимодействия магнитной подсистемы антиферромагнетика с электрическим полем лазерного импульса (речь идет о рамановском процессе). Эта энергия входит в лагранжиан системы (см. ниже) и может быть представлена в виде:

$$U_{sp}(\vartheta, \varphi, \rho, \beta) = \sum_i' \sum_{\delta=1}^6 \chi_{nmkl} E_n^{(1)} E_m^{(2)} \langle S_k^i S_l^{i+\delta} \rangle, \quad (3)$$

где суммирование проводится по всем магнитным узлам (i) и ближайшим соседям (δ). Тензор четвертого ранга χ_{nmkl} для кубической симметрии ($m\bar{3}m$) определяется только тремя ненулевыми параметрами $a_1 = \chi_{11} = \chi_{22} = \chi_{33}$, $a_2 = \chi_{12} = \chi_{21} = \chi_{13} = \chi_{31} = \chi_{23} = \chi_{32}$ и $a_3 = \chi_{44} = \chi_{55} = \chi_{66}$, где использована сокращенная запись индексов тензора. $\mathbf{E}^{(1)}(t)$ и $\mathbf{E}^{(2)}(t)$ – электрические поля сверхбыстрых лазерных импульсов, лежащие в плоскости xy , с частотами, соответственно ω_1 и ω_2 , разность которых $\omega_p = \omega_1 - \omega_2$ находится в параметрическом резонансе с частотами спиновой динамики.

Для вычисления спиновых корреляторов в выражении (3) мы будем использовать метод спиновых когерентных состояний (SCS – *spin coherent states*) [20]:

$$\langle S_k^i S_l^{i+\delta} \rangle = S^2 \langle n_k^i n_l^{i+\delta} \rangle, \quad (4)$$

где $|\mathbf{n}\rangle = e^{i\vartheta(\mathbf{n} \times \mathbf{z})} |\mathbf{z}\rangle = (1 + |\mu|^2)^{-1/2} e^{\mu_j S_j} |\mathbf{z}\rangle$, а $\mu = e^{i\varphi} \tan \frac{\vartheta}{2}$. Известно, что спиновые когерентные состояния $|\mathbf{n}_1\rangle$ и $|\mathbf{n}_2\rangle$ неортогональны и $\langle \mathbf{n}_1 | \mathbf{n}_2 \rangle = \left(\frac{1 + \mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2}{2} \right)^S$ и это создает трудности при вычислениях матричных элементов. Однако в нашем случае $\eta = |\langle \mathbf{n}_j | \mathbf{n}_{j+\delta} \rangle| = \left| \left(\frac{-\rho^2 - \beta^2 \sin^2 \vartheta}{2} \right)^S \right| \ll 1$, при малых углах $\rho, \beta \ll 1$, как показано на рис. 1с для случая $\beta = 0$. Важно, что для вычисления обменного вклада в U_{sp} (ур. (3)) нужны только матричные элементы для ближайших соседей i и $i + \delta$. Для иллюстрации приведем пару матричных элементов для актуальных корреляторов $\langle S_i^x S_{i+\delta}^x \rangle, \langle S_i^x S_{i+\delta}^y \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{n}_i, \mathbf{n}_{i+\delta} | n_i^y n_{i+\delta}^y | \mathbf{n}_i, \mathbf{n}_{i+\delta} \rangle = \\ -S^2 \sin(\vartheta_i - \rho_i) \sin(\vartheta_{i+\delta} + \rho_{i+\delta}) \times \\ \times \sin(\varphi_i + \beta_i) \sin(\varphi_{i+\delta} - \beta_{i+\delta}), \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{n}_i, \mathbf{n}_{i+\delta} | n_i^x n_{i+\delta}^y + n_i^y n_{i+\delta}^x | \mathbf{n}_i, \mathbf{n}_{i+\delta} \rangle = \\ -S^2 \sin(\vartheta_i - \rho_i) \sin(\vartheta_{i+\delta} + \rho_{i+\delta}) \sin 2\varphi_i. \end{aligned}$$

4. Лагранжиан. Для описания спиновой динамики рассматриваемого антиферромагнетика ис-

пользуется следующий Лагранжиан (для наглядности он представлен здесь в узельном представлении)

$$\mathcal{L}(\varphi_1, \vartheta_1, \rho, \beta) = T_{WZ} - U, \quad (6)$$

где

$$\begin{aligned} T_{WZ} = -S\hbar \sum_{i=1}^N \sin \vartheta_0 (\rho_i \dot{\varphi}_{1i} + \beta_i \dot{\vartheta}_{1i}) = \frac{-S\hbar \sin \vartheta_0}{2N} \times \\ \times \sum_{\mathbf{k}} (\rho_{\mathbf{k}} \dot{\varphi}_{1,-\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}} \dot{\vartheta}_{1,-\mathbf{k}} + \rho_{-\mathbf{k}} \dot{\varphi}_{1,\mathbf{k}} + \beta_{-\mathbf{k}} \dot{\vartheta}_{1,\mathbf{k}}), \end{aligned} \quad (7)$$

а

$$U = U_{ex} + U_A + \Delta U_{ex}^{sp}. \quad (8)$$

В квантовой механике кинетическая энергия спиновой системы (Весса-Зумино фактор) определяется как фаза Берри: $\gamma_B = \sum_{i=1}^2 \mathbf{A}_i \cdot \dot{\mathbf{n}}_i$, где $\mathbf{A}_i$ – векторный потенциал Берри (Berry connection), который хотя и не является калибровочно инвариантным, но сама фаза Берри калибровочно инвариантна [21].²⁾ Мы используем хорошо известную калибровку, в которой $\mathbf{A}_i \cdot \dot{\mathbf{n}}_i = (1 - \cos \vartheta_i) \dot{\varphi}_i$. Подставляя в эту формулу значения ϑ_i и φ_i из уравнений (2) получаем в первом приближении по ρ и β выражение (7) для кинетической энергии антиферромагнетика.

Если в лагранжиане (6) опустить ΔU_{ex}^{sp} , то оптимизация по ρ и β определяет известную формулу для кинетической энергии антиферромагнетика $T = \frac{\chi_{\perp}}{2\gamma^2} \left(\frac{d\mathbf{l}}{dt} \right)^2$, где $\mathbf{l}$ – нормированный на единицу антиферромагнитный вектор $\mathbf{L}$, а $\chi_{\perp}$ – перпендикулярная восприимчивость антиферромагнетика. Она совпадает с известной формулой Андреева и Марченко для кинетической энергии антиферромагнетика [23].³⁾

Уравнения спиновой динамики с таким слагаемым, описывающим кинетическую энергию и $\Delta U_{ex}^{sp} = 0$ весьма близки к уравнению математического маятника. Включение в модель слагаемого ΔU_{ex}^{sp} вносит в нее интригующие черты знаменитой задачи о математическом маятнике с вибрирующей точкой подвеса, обладающей весьма разнообразными бифуркациями, неустойчивостями и фазовыми переходами.

Формулы для U_{ex} , U_A и ΔU_{ex}^{sp} получаются из (1) и (3) усреднением по основному состоянию гамильтониана с учетом выше приведенного замечания

²⁾См. также [22] для случая двухподрешеточного антиферромагнетика, но без U_{sp} .

³⁾См. также работу [24], где дан подробный вывод этой формулы, а также диссипативной функции Релея, что замыкает полную систему спиновой динамики двухподрешеточного антиферромагнетика.

о неортогональности когерентных спиновых состояний. Из двух пар сопряженных переменных (ρ, φ) и (ϑ, β) вторую пару мы опустим в последующем анализе поскольку она, как будет показано ниже, не влияет на эффект Коттона-Мутона и не дает вклад в двупреломление при $\mathbf{E} = (E_x, E_y, 0)$.

Таким образом, подставляя в выражения (1), (3) $\mathbf{n}_i = (\sin \vartheta_i \cos \varphi_i, \sin \vartheta_i \sin \varphi_i, \cos \vartheta_i)$, полагая в них $\vartheta = \vartheta_0 + \vartheta_1$, $\varphi = \varphi_0 + \varphi_1$, где $\vartheta_1, \varphi_1 \ll 1$ и удерживая только слагаемые до второго порядка малости по $\vartheta_1, \varphi_1, \rho, \beta$ и опуская гармонические слагаемые, как обычно в рамановском процессе с частотами $\omega_1 + \omega_2$, и произведя стандартное преобразование Фурье от узельного представления к квазиимпульсному, получим

$$U_{\text{ex}} = JS^2 \frac{Z}{2N} \times \quad (9)$$

$$\times \sum_{\mathbf{k}} \left[(1 + \gamma_{\mathbf{k}}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} + \sin^2 \vartheta_0 (1 - \gamma_{\mathbf{k}}) \varphi_{1,\mathbf{k}} \varphi_{1,-\mathbf{k}} \right],$$

$$U_A = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} |K| (-\cos 2\vartheta_0 \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} + \sin^4 \vartheta_0 \varphi_{1,\mathbf{k}} \varphi_{1,-\mathbf{k}}), \quad (10)$$

$$\Delta U_{\text{ex}}^{sp} = S^2 E_0^2 \frac{Z}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \left[w_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} + \right. \right. \quad (11)$$

$$\left. + \sin^2 \vartheta_0 \frac{a_1 + a_2}{2} (1 - \gamma_{\mathbf{k}}) \varphi_{1,\mathbf{k}} \varphi_{1,-\mathbf{k}} \pm \right.$$

$$\left. \pm \frac{a_1 - a_2}{2} \sin^2 \vartheta_0 (1 + \gamma_{\mathbf{k}}) \cos 2\alpha \frac{\varphi_{1,\mathbf{k}} + \varphi_{1,-\mathbf{k}}}{2} \right] \times$$

$$\times f(t) \cos(\omega_p t + \zeta) \mp \frac{a_3}{2} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \sin 2\alpha f(t) \sin(\omega_p t + \zeta) \left\},$$

где Z – число ближайших соседей, N – число магнитных узлов в образце, $w_{\mathbf{k}} = \frac{a_1 + a_2}{2} \sin^2 \vartheta_0 +$

$a_2 \cos^2 \vartheta_0 + \gamma_{\mathbf{k}} \left(\frac{a_1 + a_2}{2} \cos^2 \vartheta_0 + a_2 \sin^2 \vartheta_0 \right)$, $f(t)$ – функция, описывающая длительность и форму импульса лазера, ζ – фаза, зависящая от начала отсчета времени, а $\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{Z} \sum_{\delta=1}^6 e^{i\mathbf{k}\delta}$.

5. Уравнения Эйлера–Лагранжа. Для описания спиновой динамики двухподрешеточного антиферромагнетика запишем уравнения Эйлера–Лагранжа для функции Лагранжа (6) со слагаемыми (7), (9) и (10), которые имеют вид

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{\mathbf{k}} - \omega_{\varphi} [1 + h_{\varphi} \psi(t)] \varphi_{1,\mathbf{k}} &= \pm T_{\mathbf{k}}^{\varphi}, \\ \dot{\varphi}_{1,\mathbf{k}} + \omega_{\rho} [1 + h_{\rho} \psi(t)] \rho_{\mathbf{k}} &= 0, \end{aligned} \quad (12)$$

где

$$\omega_{\varphi} = \frac{JSZ(1 - \gamma_{\mathbf{k}})}{2\hbar \sin \vartheta_0} + \frac{4|K|}{3S\hbar \sin \vartheta_0},$$

$$\omega_{\rho} = \frac{JSZ(1 + \gamma_{\mathbf{k}})}{2\hbar \sin \vartheta_0} - |K| \frac{\cos 2\vartheta_0}{S\hbar \sin \vartheta_0},$$

$$T_{\mathbf{k}}^{\varphi} = \frac{4E_0^2 S \sin \vartheta_0}{\hbar} \frac{a_1 - a_2}{2} \cos(2\alpha) \gamma_{\mathbf{k}} \psi(t),$$

$$h_{\varphi} = \frac{E_0^2 \sin^2 \vartheta_0}{J} \frac{a_1 + a_2}{2},$$

$$h_{\rho} = \frac{E_0^2 w_{\mathbf{k}}}{J(1 + \gamma_{\mathbf{k}})},$$

а $\psi(t) = f(t) \cos(\omega_p t + \zeta)$.

Уравнения (12) описывают динамику магнона с частотой $\omega_{\mathbf{k},\text{M}} = \sqrt{\omega_{\varphi} \omega_{\rho}}$, возбуждаемого одновременно двумя вращающимися моментами: внешним (правая часть уравнения (12)), представляющем собой обратный эффект Коттона–Мутона и внутренним – параметрическим воздействием. Последнее проявляется главным образом в области неустойчивости, то есть в области параметрического резонанса. Наличие параметрической неустойчивости значительно усиливает реакцию системы на воздействие обратного эффекта Коттона–Мутона (рис. 2а). Представим переменные $\rho_{\mathbf{k}}$ и $\varphi_{1,\mathbf{k}}$ согласно теории Флоке в виде:

$$\begin{pmatrix} \rho_{\mathbf{k}} \\ \varphi_{1,\mathbf{k}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} \\ c_{21} \end{pmatrix} e^{i\omega_p t/2} + \begin{pmatrix} c_{12} \\ c_{22} \end{pmatrix} e^{-i\omega_p t/2}, \quad (13)$$

где $c_{i1}(t)$ и $c_{i2}(t)$ – действительные функции, периодически зависящие от времени с периодом накачки ($T_p = \frac{2\pi}{\omega_p}$), очевидно, что $c_{ij,\mathbf{k}}^* = c_{ij,-\mathbf{k}}$, а частота ω является собственным значением однородной системы уравнений (12). Они аналогичны функциям Блоха в теории кристаллов, а саму исследуемую систему (12) и ей подобные параметрические системы, в последнее время называют “кристаллами времени” [25]. В данном случае, поскольку мы интересуемся лишь порогом возникновения неустойчивости вблизи основного параметрического резонанса, будем полагать $|\omega - \omega_p/2| \ll 1$.

Подставляя выражение (13) в систему уравнений (12), опуская нерезонансные члены типа $e^{i2\omega_p t}$, как обычно в теории Флоке, и полагая для достаточно длинных импульсов $f(t) \equiv 1$, после несложных вычислений можно свести задачу на собственные значения к решению четырех линейных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами. Тогда задача на собственные значения полученных дифференциальных уравнений сводится к решению алгебраического уравнения – детерминант 4×4 , составленный из коэффициентов системы уравнений (12) равен нулю, решение которого является алгебраически громоздким и мало наглядным. В

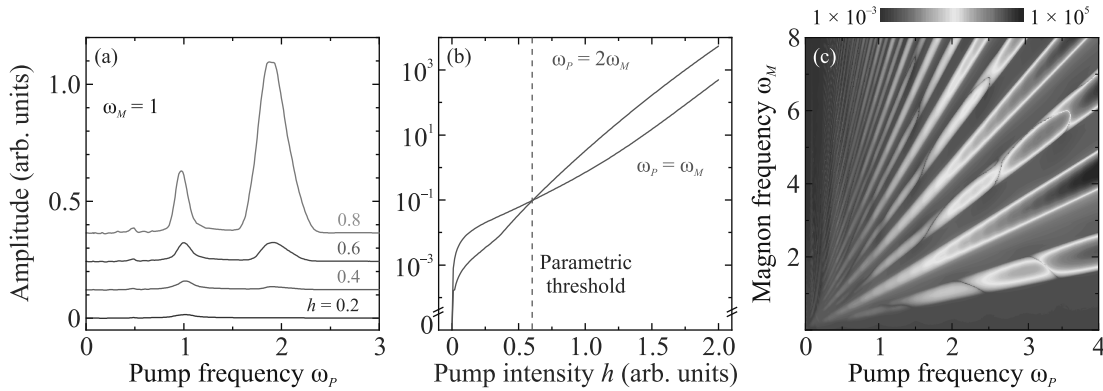


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость амплитуды наведенной эллиптичности, полученной при решении уравнения (17): (a) – от частоты импульсов накачки ω_p при различных значениях интенсивности накачки h . (b) – От интенсивности накачки h при $\omega_p = \omega_M$ и $\omega_p = 2\omega_M$. Штриховой линией показано пороговое значение параметрического возбуждения. (c) – Цветовая карта амплитуды наведенной эллиптичности (в логарифмическом масштабе) при различных частотах импульсов накачки ω_p и магнитной динамики ω_M при интенсивности накачки выше порога развития параметрической неустойчивости

частном случае $\omega_\varphi = 0$ оно значительно упрощается, сохраняя основные черты общего уравнения и может быть представлено в виде известной формулы [11]

$$\rho_{\mathbf{k}} = -\nu_{\mathbf{k}} + \sqrt{-(\omega - \omega_{\mathbf{k}})^2 + \frac{h_p^2 \omega_p^2}{4}}, \quad (14)$$

где $\rho_{\mathbf{k}}$ является мнимой частью собственной частоты ω вблизи порога параметрической неустойчивости, оно определяет инкремент возрастания амплитуды генерируемых магнонов, а $\nu_{\mathbf{k}}$ – частота затухания магнонов. Отсюда сразу следует известная формула для порогового значения развития параметрической неустойчивости при частоте накачки $\omega_p \approx 2\omega_{\mathbf{k}}$ [8], при этом величина поля накачки должна быть равна $|h_p \omega_{\mathbf{k}}| = \nu_{\mathbf{k}}$. Этот порог параметрической неустойчивости является, по-видимому, минимальным. В рассматриваемой системе могут возбуждаться и другие неустойчивые моды, характеризующиеся другими порогом и частотами (см., например, рис. 3с).

Приведенная формула для параметрического порога по частоте определяет область (поверхность) в $\mathbf{k}$ -пространстве, содержащей когерентные $\mathbf{k}$ и $-\mathbf{k}$ пары магнонов, взаимодействующие между собой через поле накачки. Такое “спаривание” магнонов напоминает куперовские пары в сверхпроводниках [11], но в отличие от последних образуется только во время накачки, хотя и может сохраняться некоторое время после прекращения накачки. Можно указать также на некоторую аналогию с рождением пар $\mathbf{k}$ и $-\mathbf{k}$ электронов методами нелинейной квантовой оптики. Такое когерентное “спаренное” состояние магнонов с точки зрения квантовой механики является запутан-

ным (entangled) состоянием и открывает интересные экспериментальные возможности.

7. Эффект Коттона–Мутона. Напомним, что эффект Коттона–Мутона (или эффект Фохта, или магнитное линейное двупреломление) – это магнитооптический эффект, который заключается в возникновении эллиптической поляризации при прохождении линейно поляризованного света через среду, плоскость поляризации которого ориентирована под углом к магнитному параметру порядка (намагниченности или антиферромагнитному вектору), квадратичный по магнитному параметру порядка [26, 27]. В свою очередь обратный эффект Коттона–Мутона проявляется в изменении магнитного параметра порядка по действием линейно-поляризованного света [1].

Генерация спиновых волн, индуцированная накачкой, описываемая функциями $\rho_{\mathbf{k}}$ и $\frac{\varphi_{1,\mathbf{k}} + \varphi_{1,-\mathbf{k}}}{2}$ может быть обнаружена зондирующими импульсами через линейное магнитное двупреломление (т.е. прямым эффектом Коттона–Мутона). Дифференцируя $\Delta U_{\text{ex}}^{sp}$ (11) дважды по E_x и дважды по E_y , получаем

$$\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} = \mp JS^2 Z \sin^2 \vartheta_0 \sum_{\mathbf{k}} (1 + \gamma_{\mathbf{k}}) \frac{\varphi_{1,\mathbf{k}} + \varphi_{1,-\mathbf{k}}}{2}. \quad (15)$$

Подставляя выражение (15) в уравнение Френеля при $\mathbf{K} = (0, 0, 1)$, получим формулу для эффекта двупреломления [26].

$$\frac{\Delta n}{n_0} = n_1 - n_2 \approx \pm \frac{2}{3} \frac{\varkappa}{n_0^2} \sum_{\mathbf{k}} (1 + \gamma_{\mathbf{k}}) \frac{\varphi_{1,\mathbf{k}} + \varphi_{1,-\mathbf{k}}}{2}, \quad (16)$$

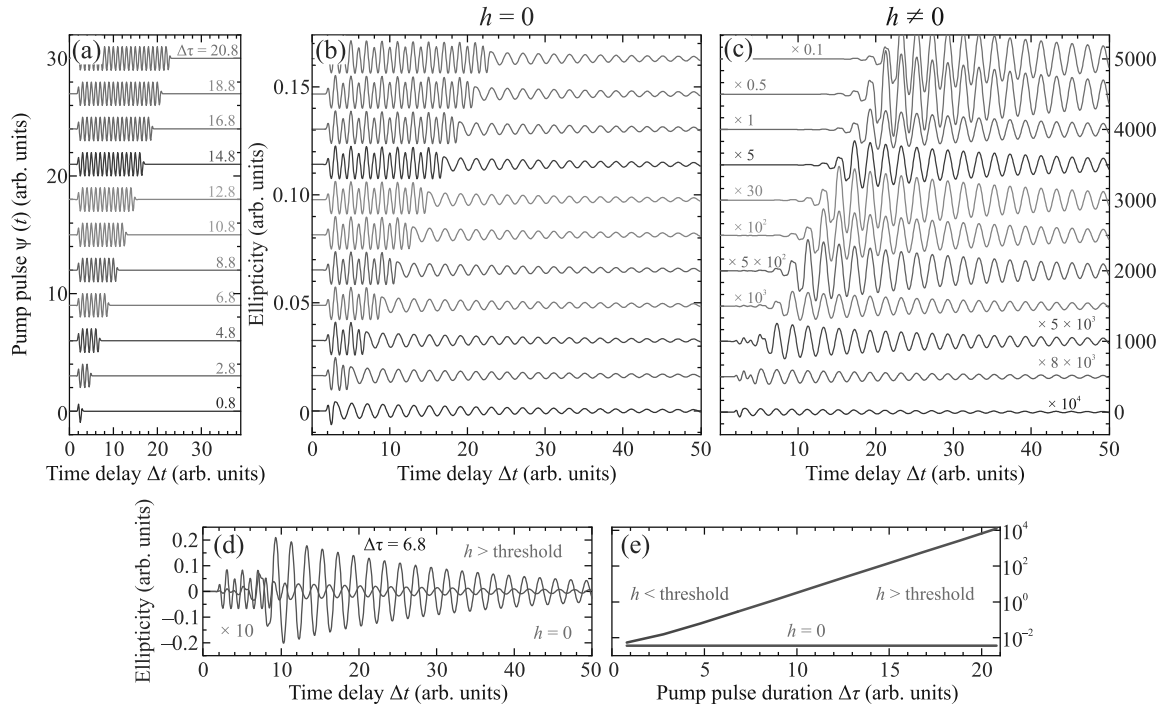


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Временные профили импульсов накачки $\psi(t)$ разной длительности $\Delta\tau$, рассчитанные согласно уравнению (18). Временные зависимости эллиптичности, индуцированной лазерными импульсами с поляризацией $\mathbf{E} \parallel x$ (из панели (а)), полученные при решении уравнения (17) при $\omega_p = 2\omega_M$ и (б) – равном и (с) – не равном нулю параметре h . На панелях (с) и (д) указаны масштабирующие множители. Цветами на панелях (а), (б) и (с) обозначены равные длительности импульсов накачки $\Delta\tau$. (д) – Временные зависимости эллиптичности индуцированной лазерными импульсами накачки длительностью $\Delta\tau = 6.8$ при параметре h , равном нулю, а также выше порога развития параметрической неустойчивости. (е) – Зависимости амплитуды наведенной эллиптичности от длительности лазерных импульсов накачки $\Delta\tau$ при параметре h , равном нулю и не равном нулю со значениями ниже и выше порога развития параметрической неустойчивости

где показатель двупреломления $\varkappa$, который, согласно симметрии, можно определить через диэлектрическую проницаемость как $\varepsilon_{ii} = \varepsilon_0 + \varkappa l_i^2$ и который измеряется стандартными методами в равновесных условиях, в данной модели $\varkappa = JS^2ZN$, n_0 – показатель преломления, а $\varphi_{1,\mathbf{k}}(t) = \frac{\dot{\varphi}_{0,\mathbf{k}} \mp 2T_{\mathbf{k}}^\varphi}{\omega_\varphi}$ определяется уравнением (12), а знаки $\pm$ относятся к доменам с $\varphi = \frac{\pi}{2}$ и $\frac{3\pi}{2}$. Стоит отметить, что экспериментально в магнитооптическом эффекте Коттона–Мутона напрямую измеряется не двупреломление а эллиптичность света, которая прямо пропорциональна двупреломлению среды Δn через ее толщину [28]. Таким образом, далее мы будем обсуждать эллиптичность, наведенную импульсом накачки, полагая толщину антиферромагнетика равной единице.

8. Моделирование спиновой динамики. В общем случае при $h_\varphi \neq 0$ и $h_\rho \neq 0$ решение системы дифференциальных уравнений (12), описыва-

ющей спиновую динамику антиферромагнетика, наведенную импульсом накачки, является весьма громоздким. На рисунке 1d показана цветовая карта, соответствующая разности амплитуд осцилляций эллиптичности, наведенных импульсами накачки параметрически ($\omega_P = 2\omega_M$) и резонансно ($\omega_P = \omega_M$). Участки вне черной области соответствуют коэффициентам h_φ и h_ρ , при которых развивается параметрическая неустойчивость и амплитуда осцилляций, наведенных параметрически превосходит наведенные резонансно и их разность положительна. Границы черной области соответствуют пороговым значениям параметрической неустойчивости.

Для выяснения основных особенностей параметрического резонанса и увеличения эффекта Коттона–Мутона за счет параметрической неустойчивости мы ограничимся моделированием частного случая, когда $a_1 = -a_2$ ($h_\varphi = 0$, $h = h_\rho$). В этом случае систему уравнений (12) можно свести к дифференциальному уравнению второго порядка с

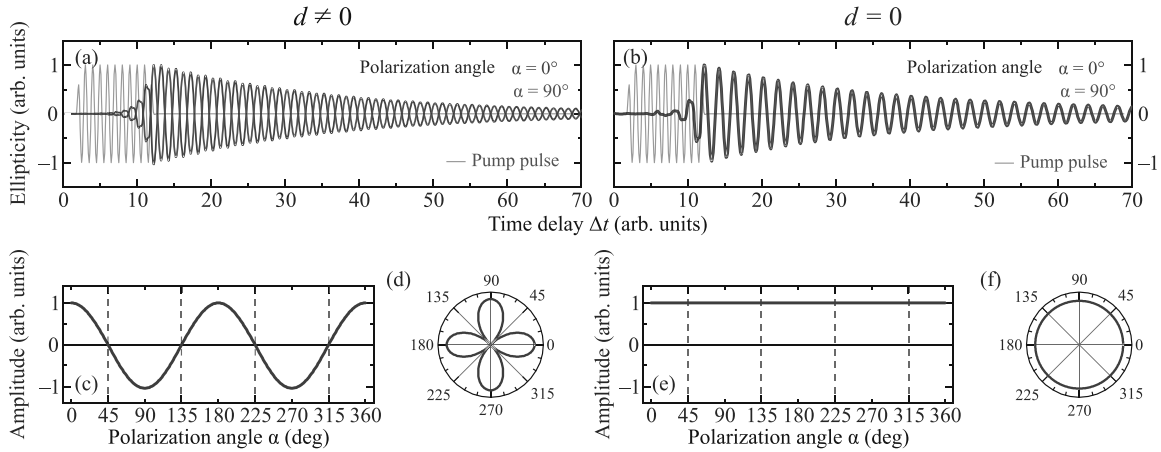


Рис. 4. (Цветной онлайн) Временные зависимости, эллиптичности индуцированной лазерными импульсами с поляризациями $\mathbf{E}$, направленными вдоль осей x ($\alpha = 0^\circ$, синяя кривая) и y ($\alpha = 90^\circ$, красная кривая) благодаря параметрическому резонансу и обратному эффекту Коттона-Муттона в двухподрешеточном антиферромагнетике, рассчитанные: (a) – с учетом ($d \neq 0$) и (b) – без учета ($d = 0$) правой части уравнения (17). Зависимости амплитуды осцилляций индуцированной эллиптичности от угла поляризации электрического поля $\mathbf{E}$ лазерного импульса α , рассчитанные (c), (d) – с учетом ($d \neq 0$) и (e), (f) – без учета ($d = 0$) правой части уравнения (17). Смена знака на панели (c) при изменении угла α соответствует изменению фазы осцилляций эллиптичности на π . На полярных диаграммах (d), (f) показан модуль амплитуды осцилляций наведенной эллиптичности

постоянными коэффициентами подробно изученного во многих работах по теории параметрического резонанса [8, 11, 29, 12]. Введем новую переменную $\varrho = \rho_{\mathbf{k}} + \rho_{-\mathbf{k}}$, которая описывает упомянутое выше когерентное, спаренное состояние с нулевым квазиимпульсом. Тогда исключая переменную $\varphi_{0,\mathbf{k}}$, система уравнений (12) может быть преобразована в уравнение второго порядка для ϱ

$$\ddot{\varrho} + \frac{2}{\tau} \dot{\varrho} + \omega_\varphi \omega_\rho [1 + h \psi(t)] \varrho = d \dot{\psi}(t) \cos 2\alpha, \quad (17)$$

где для моделирования использованы безразмерные величины: τ – затухание, $\sqrt{\omega_\varphi \omega_\rho}$ – собственная частота спиновой динамики, h – величина, пропорциональная интенсивности лазерного импульса накачки, d – параметр, определяющий величину эффекта Коттона-Муттона и интенсивность накачки, время t измеряется в периодах колебаний импульса накачки. Функция $\psi(t)$ описывает длительность и форму импульса накачки в соответствии с выражением

$$\psi(t) = \left[\frac{1}{e^{n(t-t_2)} + 1} - \frac{1}{e^{n(t-t_1)} + 1} \right] \cos(\omega_p t), \quad (18)$$

где t_1 и t_2 – время начала и конца импульса накачки ($\Delta\tau = t_2 - t_1$), n – крутизна возрастания и спада импульса. Стоит отметить, что производная по времени от угла скоса подрешеток $\dot{\rho}$, которая является решением уравнения (17), определяет зависимость от времени для наведенной эллиптичности согласно выражению (16).

В эксперименте по лазерно-индуцированной магнитной динамике в гейзенберговском антиферромагнетике RbMnF_3 был использован импульс накачки длительностью 45 фс и центральной энергией 1.03 эВ [30]. Параметры в выражении (18) были подобраны таким образом, чтобы в модели импульса накачки было также, как в эксперименте около 10 периодов ($\Delta\tau = t_2 - t_1 = 10$), как показано зеленой кривой на рис. 4а и б. Решая уравнение (17) с частотой накачки $\omega_p = 2\omega_M$ и интенсивностью h выше порога развития параметрической неустойчивости, были получены временные зависимости наведенной эллиптичности, рассчитанные используя выражение (16), содержащие осцилляции на частоте ω_M , как показано на рис. 4а. Кроме того, видно, что для двух поляризаций импульса накачки $\mathbf{E}$ вдоль осей x ($\alpha = 0^\circ$, синяя кривая) и y ($\alpha = 90^\circ$, красная кривая) фаза наведенной эллиптичности меняется на π . Более того, как видно на рис. 4с и d при повороте плоскости поляризации импульса накачки ($\alpha = 0..360^\circ$) амплитуда наведенной эллиптичности ведет себя как $\cos 2\alpha$, где смена знака соответствует изменению фазы осцилляций на π , что соответствует результату полученному в эксперименте [30]. При этом, если в уравнении (17) правую часть положить равной нулю ($d = 0$), то при таких же параметрах импульсов накачки осцилляции наведенной эллиптичности будут возбуждаться на той же частоте ω_M (см. рис. 4б), но их амплитуда

не зависит от угла поляризации, как показано на рис. 4е и ф.

Анализ решений уравнения (17) с фиксированной собственной частотой спиновой динамики ω_M и изменяющейся частоте импульсов накачки ω_p при нескольких значениях интенсивности h показал, что при совпадении частот $\omega_p = \omega_M$ наводится эллиптичность при любых положительных интенсивностях h , как показано на рис. 2а. Напротив, при параметрическом возбуждении с частотой накачки $\omega_p = 2\omega_M$ амплитуда осцилляций наведенной эллиптичности имеет ярко выраженный пороговый характер по интенсивности накачки h . При $h > 0.57$ спиновая динамика наиболее эффективно возбуждается при параметрической накачке с $\omega_p = 2\omega_M$ чем при резонансной $\omega_p = \omega_M$ как можно видеть на рис. 2а и б. Вообще говоря, величина порога развития параметрической неустойчивости зависит от длительности импульса накачки, чем больше длительность, тем ниже порог. Кроме того, величина порога зависит от формы импульсов накачки, что требует дальнейшего исследования. Амплитуда наведенных осцилляций эллиптичности при параметрическом возбуждении $\omega_p = 2\omega_M$ экспоненциально зависит от интенсивности накачки h при значениях выше порога, как показано на рис. 2б. Стоит отметить, что в эксперименте зависимость амплитуды осцилляций наведенной эллиптичности от интенсивности накачки была линейной [30]. По-видимому, это связано с тем, что в нашем рассмотрении не учитываются нелинейные эффекты, ограничивающие параметрическое возбуждение. От параметра d , стоящего в правой части уравнения (17), амплитуда осцилляций наведенной эллиптичности зависит линейно, что указывает на то, что этот коэффициент определяет величину эффекта Коттона–Муттона в этом процессе.

На карте, изображенной на рис. 2с, приведена цветом зависимость амплитуды наведенных осцилляций эллиптичности от частоты импульсов накачки ω_p и собственных частот спиновой динамики ω_M . Зеленый цвет соответствует минимальным значениям, коричневый максимальным, масштаб по интенсивности логарифмический. Видно, что при накачке с частотой ω_p возбуждаются не только спиновая динамика на половинной частоте $\omega_M = \omega_p/2$, но и на резонансной частоте $\omega_M = \omega_p$ и других частотах.

Далее были рассмотрены решения уравнения (17) для случаев, когда параметр $h = 0$, т.е. без параметрической неустойчивости, и $h \neq 0$ при разной длительности импульсов накачки $\Delta\tau$ с временным профилем $\psi(t)$ и частотой $\omega_p = 2\omega_M$, как показано на рис. 3. Далее импульсы накачки будут поляризованы

вдоль оси x , если не указано иное. В случае, когда параметр $h = 0$ осцилляции эллиптичности наводятся при любой длительности импульсов накачки $\Delta\tau$, а их амплитуда не зависит от длительности, как показано на рис. 3б и е. Напротив, при параметре $h \neq 0$, согласно уравнению (17), амплитуда осцилляций наведенной эллиптичности экспоненциально возрастает с увеличением длительности импульсов $\Delta\tau$, как можно видеть на рис. 3с и е. Временные зависимости наведенной эллиптичности изображены с учетом масштабных множителей, приведенных на рис. 3с и д. При параметрическом возбуждении резкий рост амплитуды осцилляций наведенной эллиптичности наблюдается по времени сразу после действия импульса накачки, т.е. через время $\Delta\tau$, как можно увидеть на рис. 3д. Как было отмечено ранее, порог развития параметрической неустойчивости зависит от длительности импульса $\Delta\tau$ и фиксированная величина параметра h для импульсов с $\Delta\tau < 6$ меньше порога, а при $\Delta\tau > 6$ превосходит его, как указано на рис. 3е. В результате, с ростом длительности импульса $\Delta\tau$ накачки наблюдается гигантское параметрическое усиление обратного эффекта Коттона–Муттона в антиферромагнетике.

Механизм, рассмотренной в статье параметрической неустойчивости, может реализовываться как результат следующих процессов взаимодействия света со спинами. Во-первых, электрическое поле лазерного импульса $\mathbf{E}$, модулируя обменное взаимодействие спинов $\mathbf{J}\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j$, создает условие для параметрической неустойчивости. Это может происходить, например, за счет обратного магниторефрактивного эффекта [31, 32]. Обратный эффект Коттона–Муттона создает внешний вращающий момент действующий на спины, приводит к “ ρ -скосу” соседних спинов (“ ρ -canting”), обеспечивает “азимутальный” выход спинов, а следовательно, и антиферромагнитного вектора $\mathbf{L}$ из положения равновесия. При этом обеспечивается параметрическая неустойчивость даже при нулевых начальных условиях. В свою очередь, зависимость генерации магнонов от поляризации падающего света задается поляризационной зависимостью обратного эффекта Коттона–Муттона и пропорциональна $\cos 2\alpha$.

Закключение. В работе представлены результаты теоретического исследования влияния скоса магнитных подрешеток под действием короткого лазерного импульса накачки на параметрическое возбуждение обратного эффекта Коттона–Муттона в гейзенберговском антиферромагнетике. Показано, что интенсивность обратного эффекта Коттона–Муттона очень сильно возрастает вблизи параметрического

резонанса, т.е. в области параметрической неустойчивости. Показано, что эллиптичность, наведенная импульсом накачки, пропорциональна производной по времени от угла скоса магнитных подрешеток. Установлено, что угол скоса магнитных подрешеток описывается дифференциальным уравнением параметрического резонанса типа Хилла с возбуждающей силой. Выявлено, что параметрически наведенная эллиптичность, при наличии возбуждающей силы в дифференциальном уравнении зависит от угла между поляризацией импульсов накачки и основными кристаллографическими осями как $\cos 2\alpha$, причем при повороте плоскости поляризации на 90° фаза осцилляций меняется на π . При этом, когда возбуждающая сила равна нулю амплитуда осцилляций не зависит от угла поляризации. Установлено, что параметрическое возбуждение наведенной эллиптичности происходит при превышении интенсивности импульса накачки порогового значения. Показано, что амплитуда наведенной эллиптичности при параметрическом возбуждении зависит экспоненциально от длительности и интенсивности импульса накачки.

Финансирование работы. А.К. Звездин благодарит за финансовую поддержку Российский научный фонд (грант # 22-12-00367). Р.М. Дубровин благодарит за финансовую поддержку Министерство науки и высшего образования (соглашение FSWR-2021-011) и Российский научный фонд (грант # 22-72-00025).

Конфликт интересов. Конфликт интересов отсутствует.

Авторы заявляют, что эта работа была опубликована в результате равноправного научного сотрудничества между исследователями. Предоставленные аффилиации отражают фактические адреса авторов в соответствии с их цифровым идентификатором (ORCID) и не могут рассматриваться как официальное сотрудничество между вышеупомянутыми учреждениями.

1. А.М. Калашникова, А.В. Кимель, Р.В. Писарев, УФН **185**, 1064 (2015).
2. В.Я. Kotyuzhanskii and L. A. Prozorova, ZhETF **81**, 1913 (1981).
3. C.W. Sandweg, Y. Kajiwara, A.V. Chumak, A.A. Serga, V.I. Vasyuchka, M.B. Jungfleisch, E. Saitoh, and B. Hillebrands, Phys. Rev. Lett. **106**, 216601 (2011).
4. S.W. Teitelbaum, T. Henighan, Y. Huang, H. Liu, M.P. Jiang, D. Zhu, M. Chollet, T. Sato, É.D. Murray, S. Fahy, S. O'Mahony, T.P. Bailey, C. Uher, M. Trigo, and D.A. Reis, Phys. Rev. Lett. **121**, 125901 (2018).
5. S. Maehrlein, A. Paarmann, M. Wolf, and T. Kampfrath, Phys. Rev. Lett. **119**, 127402 (2017).
6. A. Cartella, T.F. Nova, M. Fechner, R. Merlin, and A. Cavalleri, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **115**, 12148 (2018).
7. D.M. Juraschek, Q. N. Meier, and P. Narang, Phys. Rev. Lett. **124**, 117401 (2020).
8. H. Suhl, J. Phys. Chem. Solids **1**, 209 (1957).
9. E. Schlömann, Phys. Rev. **116**, 828 (1959).
10. E. Schlömann, J. J. Green, and U. Milano, J. Appl. Phys. **31**, S386 (1960).
11. V. E. Zakharov, V. S. L'vov, and S. S. Starobinets, Sov. Phys.-Uspekhi **17**, 896 (1975).
12. А.Г. Гуревич, Г.А. Мелков, *Магнитные осцилляции и волны*, Наука, М. (1994).
13. V. I. Ozhogin and A. Yu. Yakubovsky, Phys. Lett. A **43**, 505 (1973).
14. V. S. L'vov and M. I. Shirokov, ZhETF **67**, 1932 (1974).
15. S. A. Govorkov, V. A. Tulin, ZhETF **70**, 1876 (1976).
16. A. S. Borovik-Romanov and L. A. Prozorova, Contemp. Phys. **19**, 311 (1978).
17. A. I. Smirnov, ZhETF **84**, 2290 (1983).
18. V. S. L'vov and L. A. Prozorova, *Spin Waves Above the Threshold of Parametric Excitations*, Elsevier, Amsterdam (1988).
19. D. T. Teaney, M. J. Freiser, and R. W. H. Stevenson, Phys. Rev. Lett. **9**, 212 (1962).
20. A. M. Perelomov, Sov. Phys.-Uspekhi **20**, 703 (1977).
21. E. Fradkin, *Field theories of condensed matter physics*, Cambridge University Press, N.Y. (2013).
22. A. K. Звездин, Краткие сообщения по физике ФИАН **12**, 13 (1999); arXiv preprint cond-mat/0004074 (2000).
23. А.Ф. Андреев, В.И. Марченко, УФН **130**, 39 (1980).
24. А.К. Звездин, А.А. Мухин, Краткие сообщения по физике ФИАН **12**, 10 (1981).
25. K. Sacha and J. Zakrzewski, Rep. Prog. Phys. **81**, 016401 (2017).
26. A. K. Zvezdin and V. A. Kotov, *Modern Magneto-optics and Magneto-optical Materials*, CRC Press, Boca Raton (1997).
27. J. Ferré and G. A. Gehring, Rep. Prog. Phys. **47**, 513 (1984).
28. Г.А. Смоленский, Р.В. Писарев, И.Г. Синий, УФН **116**, 231 (1975).
29. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Теоретическая физика. Том 1. Механика*, Наука, М. (1973).
30. F. Formisano, T. T. Gareev, D. I. Khusyainov, A. E. Fedianin, R. M. Dubrovina, P. P. Syrnikov, D. Afanasiev, R. V. Pisarev, A. M. Kalashnikova, J. H. Mentink, and A. V. Kimel, APL Mater. **12**, 011105 (2024).
31. R. R. Subkhangulov, A. B. Henriques, P. H. O. Rappl, E. Abramof, Th. Rasing, and A. V. Kimel, Sci. Rep. **4**, 4368 (2014).
32. R. V. Mikhaylovskiy, E. Hendry, A. Secchi, J. H. Mentink, M. Eckstein, A. Wu, R. V. Pisarev, V. V. Kruglyak, M. I. Katsnelson, Th. Rasing, and A. V. Kimel, Nat. Commun. **6**, 8190 (2015).

Дробовой шум в геликоидальных краевых состояниях в присутствии статического магнитного дефекта¹⁾

Р. А. Ниязов^{+,*2)}, И. В. Крайнов*, Д. Н. Аристов^{+,*×}, В. Ю. Качоровский*

⁺Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Петербургский институт ядерной физики, 188300 Гатчина, Россия

*Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, 194021 С.-Петербург, Россия

[×]Санкт-Петербургский государственный университет, 199034 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 28 декабря 2023 г.

После переработки 23 января 2024 г.

Принята к публикации 24 января 2024 г.

Вычислен фактор Фано, $\mathcal{F}$, дробового шума тока через краевые состояния двумерного топологического изолятора с контактами общего вида. Магнитный статический дефект сильно меняет $\mathcal{F}$. Для металлических контактов, по мере увеличения силы дефекта фактор Фано растет от значения $\mathcal{F} = 0$, достигает максимума, $\mathcal{F}_{\max} \approx 0.17$, и далее падает, обращаясь опять в ноль в пределе очень сильного дефекта. Для туннельных контактов в пределе инфинитезимально слабой туннельной связи, фактор Фано нечувствителен к силе дефекта: $\mathcal{F} \rightarrow 1/2$. При слабой, но конечной силе туннельной связи, $\mathcal{F}$ демонстрирует периодическую серию острых пиков малой амплитуды при изменении магнитного потока через образец, которые при дальнейшем увеличении силы туннельной связи переходят в гармонические осцилляции Ааронова–Бома.

DOI: 10.31857/S1234567824050070, EDN: DUEBZQ

I. Введение. Одной из горячих тем, активно обсуждаемых в последнее десятилетие, является изучение электрических и оптических свойств топологических изоляторов (ТИ), т.е. материалов, которые являются изоляторами в объеме, но имеют проводящие состояния на границе [1–3]. В частности, в двумерных (2D) топологических изоляторах нетривиальная топология объемных зон приводит к появлению геликоидальных одномерных (1D) состояний, которые переносят ток по краям образца без диссипации. Распространение электронов в таких 1D-каналах характеризуется определенной киральностью, т.е. электроны с противоположными спинами распространяются в противоположных направлениях. Замечательным следствием этого является запрет рассеяния на немагнитных примесях, и именно благодаря этому свойству в таких каналах отсутствует диссипация.

Наиболее известной реализацией 2D ТИ являются квантовые ямы в соединениях на основе HgTe/CdTe, топологические свойства которых были предсказаны теоретически [4, 5] и подтверждены серией экспериментов, включая измерения кондак-

танса краевых состояний [6] и экспериментальные доказательства нелокального транспорта [7–10].

Если присоединить к краю 2D топологического изолятора два немагнитных контакта и сдвинуть (например, с помощью затвора) уровень Ферми в запрещенную зону, то кондактанс такого прибора будет полностью определяться свойствами краевых состояний (см. рис. 1). Поскольку границу образца можно

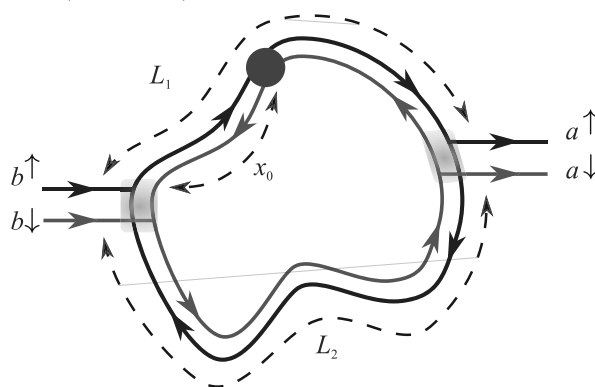


Рис. 1. (Цветной онлайн) Геликоидальный интерферометр АБ. Зеленая точка обозначает магнитный дефект. Области контактов выделены серым цветом

обойти в двух направлениях, то такая система является интерферометром. Соответственно, как средний ток, так и его шум зависят от интерференционных

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

²⁾e-mail: niyazov_ra@pnpi.nrcki.ru

эффектов и, как следствие, наблюдаемыми величинами в таких системах можно управлять за счет эффекта Ааронова–Бома (АБ) [11–17]: они периодически зависят от магнитного потока, пронизывающего область, охваченную электронными состояниями.

Обычно интерференция затухает, когда T становится больше расстояния Δ между уровнями в системе. Как было недавно показано теоретически [14–17], для интерферометров АБ на основе геликоидальных краевых состояний (ГКС) это не так, и интерференция сохраняется даже для случая $T \gg \Delta = 2\pi v_F/L$ где $L = L_1 + L_2$, $L_{1,2}$ – длины плеч интерферометра, а v_F – скорость Ферми. Для типичной скорости Ферми порядка 10^7 см/с и типичных размеров системы (> 1 микрона), величина Δ не превышает нескольких градусов Кельвина. Это означает, что интерференционные эффекты в системах на основе ГКС могут быть изучены при относительно высоких температурах, актуальных для различных приложений.

Недавно мы обсуждали кондактанс геликоидальных интерферометров АБ [14–17] и свойства туннельной цепочки геликоидальных колец АБ [18, 19]. Здесь мы обсудим еще одну наблюдаемую величину – дробовой шум тока.

Дробовый шум в ГКС уже многократно обсуждался [20–32]. Тем не менее, роль интерференционных эффектов в шуме ранее обсуждалась только в геометрии, отличной от рис. 1, и в другом режиме, $(T, eV) \ll \Delta$, где V – напряжение смещения [22, 23]. Обычно же рассматривается бесконечная граница ТИ, в которой имеется какой то дефект, приводящий к рассеянию назад (например, динамическая магнитная примесь). В реальности, неполяризованные по спину электроны, входящие в ГКС через немагнитный контакт (как туннельный, так и металлический), с равной вероятностью вылетают как направо с некоторым спином, так и налево с противоположным спином (см. ниже выражение (7) для матрицы рассеяния немагнитного контакта). Поэтому в образце конечного размера в стандартной двухтерминальной геометрии (см. рис. 1) электрон может достичь второго контакта и выйти из образца, двигаясь по или против часовой стрелки. Более того, для любых контактов, за исключением чисто металлических (например, для туннельных контактов или квантовых точечных контактов), имеется конечная вероятность пройти мимо контакта без выхода из образца, т.е. как “правые”, так и “левые” электроны могут сделать несколько намоток вокруг образца перед выходом в контакт и соответствующие процессы могут интерферировать. Отметим, что квантовые точечные контакты к ГКС

уже реализованы экспериментально [33], так что возможные проявления интерференционных эффектов в кондактансе и шуме допускают экспериментальную проверку, а интересующий нас режим, $T \gg \Delta$, не требует очень жестких ограничений по температуре.

В то же время, в отличие от стандартного интерферометра АБ на основе обычных (не геликоидальных состояний) в геликоидальном интерферометре “правые” и “левые” электронные состояния имеют противоположные спины в каждой точке и, как следствие, интерференция в баллистическом случае отсутствует. Интерференционные вклады в кондактанс и шум появляются при наличии рассеяния назад в одном из плечей интерферометра. Такое рассеяние может быть вызвано, например, магнитным дефектом или же заряженным островком, туннельно-связанным с ГКС. Важно отметить, что интерференционные эффекты в геликоидальном интерферометре не сводятся к осцилляциям АБ (примеры интерференционных процессов, не зависящих от магнитного поля, приведены в [16], см. секцию IV).

Задача о динамической магнитной примеси в ГКС изучена весьма подробно (см., например, работы [25, 28–32]). Основная идея состоит в учете обратного влияния электронов в бесконечном геликоидальном краевом состоянии на магнитную примесь, магнитный момент которой меняет направление при каждом акте рассеяния. В этом случае, при изотропном обменном взаимодействии между примесью и ГКС за некоторое время (так называемое время Корринги) магнитный момент примеси релаксирует к направлению электронного спина в ГКС в точке расположения примеси, и, как следствие, взаимодействие между примесью и ГКС полностью “выключается” (см. обсуждение в [25]). Соответственно, задача об интенсивности шума на нулевой частоте в ГКС с одной примесью имеет смысл только при наличии анизотропного обменного взаимодействия [28] (или внешнего магнитного поля, действующего на динамическую примесь, см. обсуждение в [32]). Это видно, например, из конечных формул для фактора Фано (ФФ), полученных в работе [28]. Эти формулы сингулярны в пределе изотропного обмена ($p = 1$, $q = 1$ в обозначениях [28]), т.е. результат для ФФ зависит от порядка устремления к нулю констант, отвечающих за анизотропию (см. также обсуждение в работе [27]).

В этом смысле, измерение ФФ в эксперименте, отвечающем постановке задачи [28], даст больше информации о свойствах примеси (например, о константах анизотропного обмена), чем непосредственно о ГКС. В то же время, в реальной ситуации, релак-

сация магнитного момента примеси обусловлена не только взаимодействием с ГКС, но также и с окружением данной примеси, что немедленно даст не сингулярный ответ для $\Phi\Phi$ и в случае изотропной примеси. Поэтому, представляется не менее интересным изучить случай, полностью противоположный случаю, рассмотренному в работах [25, 28–32], а именно, случай статического магнитного дефекта с большим спином, который жестко связан с внешним окружением. В такой постановке влиянием ГКС на магнитный момент дефекта можно пренебречь. Именно такой случай мы рассмотрим в настоящей работе.

Более конкретно, мы предполагаем, что имеется потенциальный диэлектрический ферромагнитный контакт (магнитная игла) с большой магнитной жесткостью (*magnetic stiffness*). Направление магнитного момента дефекта определяется анизотропией обмена и тензором размагничивания. Такой дефект обеспечивает существование магнитного поля в малой области ГКС, т.е. допускает упругое рассеяние назад, но не приводит к туннельной связи с ГКС. Заметим, что возможность создания статических магнитных контактов к ГКС уже обсуждалась в другом контексте [34]. В принципе, интересующие нас эффекты интерференции могли бы наблюдаться и при наличии точечного немагнитного рассеивателя с учетом электрон-электронного взаимодействия [35]. В последнем случае, однако, требуется анализ неупругих эффектов, что выходит за рамки настоящей работы.

Для одного бесспинового квантового канала интенсивность дробового шума пропорциональна произведению коэффициента прохождения $\mathcal{T}$ и коэффициента отражения $\mathcal{R} = 1 - \mathcal{T}$ рассеивателя:

$$S(\omega = 0) \propto \mathcal{T}(1 - \mathcal{T}).$$

Удобной мерой дробового шума является $\Phi\Phi$, $\mathcal{F} = S(\omega = 0)/2eI$, где I – ток в канале.

Экспериментальное измерение $\Phi\Phi$ при нулевом магнитном поле для краевых состояний 2D ТИ дает значение $0.1 < \mathcal{F} < 0.3$ [24, 26]. Верхнее значение, 0.3, близко к значению $1/3$ для диффузионного проводника. Похожий ответ получается [36] в модели большого числа “островков”, туннельно-связанных с ГКС, в которых может релаксировать спин. Наличие таких островков активно дискутируется в настоящее время [37].

В данной работе мы изучаем $\Phi\Phi$ дробового шума для тока, протекающего через краевые состояния ТИ, к которому присоединены два одинаковых контакта, которые могут быть металлическими или туннельными. К контактам приложено фиксированное

напряжение V . Мы рассмотрим наиболее интересный и легко реализуемый в эксперименте случай:

$$\Delta \ll T \ll eV. \quad (1)$$

Для простоты, мы моделируем внешнюю систему обычной (не геликоидальной) одноканальной проволокой со спином и описываем связь интерферометра с внешней системой вещественными амплитудами t, r ($t^2 + r^2 = 1$), где r – амплитуда прыжка из внешнего контакта в краевое состояние образца, а t – амплитуда прохождения по ГКС мимо контакта (без выхода из образца) при движении электрона вдоль геликоидального края (см. рис. 2). Хотя такая модель

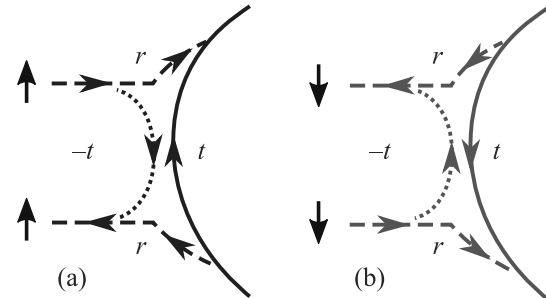


Рис. 2. (Цветной онлайн) Амплитуды рассеяния контактов, которые для простоты моделируются одноканальной проволокой со спином. Предполагается, что переворота спина на контакте не происходит и две поляризации спина в контакте полностью разделяются (проиллюстрировано красным и синим цветом). Случай $t \rightarrow 1$ отвечает туннельному контакту, а случай $t \rightarrow 0$ моделирует металлический контакт

контакта и является весьма упрощенной, она стандартно используется в квантовой интерферометрии, начиная с работы [38], поскольку позволяет описать переход от металлического контакта ($t = 0$ в случае контакта к ГКС) к туннельному ($t = 1$). В частности, она позволяет качественно описать квантовые точечные контакты к ГКС, которые уже использовались в недавнем эксперименте [33].

Предполагается, что на краю системы имеется статический МД. Цель работы – вычислить $\mathcal{F}(t, \theta, \phi)$, где θ описывает силу рассеяния на магнитном дефекте ($\theta = 0$ – отсутствие дефекта, $\theta = \pi/2$ – сильный, идеально отражающий, дефект), а $\phi = \Phi/\Phi_0$, где Φ – магнитный поток через образец, а Φ_0 – квант потока. Как мы покажем, для металлических контактов $\mathcal{F}$ не зависит от ϕ , а магнитный дефект сильно усиливает $\Phi\Phi$. Существует оптимальное значение силы дефекта $\theta_{\max} \approx 0.28\pi$, что дает максимальное значение $\Phi\Phi$, $\mathcal{F}_{\max} \approx 0.17$. Напротив, для туннельных контактов, $\Phi\Phi$ нечувствителен как к потоку, так и к силе дефекта и равен $\mathcal{F}(1, \theta, \phi) = 1/2$. Более того,

для контактов, у которых амплитуда t близка, но не в точности равна 1, МД *уменьшает* ФФ. Мы также продемонстрируем, что для контакта с промежуточной силой связи $0 < t < 1$, внешнее магнитное поле влияет на ФФ, хотя полное относительное изменение $\mathcal{F}$ при изменении ϕ от нуля до единицы достаточно мало ($\lesssim 0.1$).

II. Постановка задачи. Токовый шум связан с колебаниями электрического тока относительно его среднего значения $\delta\hat{I}(t) = \hat{I}(t) - \langle\hat{I}\rangle$. Токовая корреляционная функция, связанная с шумом, определяется следующим образом:

$$\mathcal{S}(t-t') = \frac{1}{2} \langle \delta\hat{I}(t)\delta\hat{I}(t') + \delta\hat{I}(t')\delta\hat{I}(t) \rangle.$$

Здесь $\hat{I}$ – оператор тока (аналитическое выражение для $\hat{I}$ приведено в работах [39, 40]. Преобразование Фурье от $\mathcal{S}$ дает выражение мощности шума: $S(\omega) = 2 \int_{-\infty}^{\infty} S(t) \exp(i\omega t) dt$ (фактор 2 в этом выражении является предметом соглашения, см. формулу (1) в [39] и комментарий после формулы (49) в [40]).

Спин-зависимый транспорт через двухтерминальное устройство полностью характеризуется матрицей амплитуд прохождения $\hat{t} = t_{\alpha\beta}$ (здесь α и β – спиновые индексы, связанные с исходящими и входящими электронами, соответственно) [39, 40]:

$$S(\omega = 0) = \frac{2e^2}{h} \int_{\mu}^{\mu+eV} d\varepsilon \text{Tr} \left[\hat{\mathcal{T}}(\varepsilon) (1 - \hat{\mathcal{T}}(\varepsilon)) \right], \quad (2)$$

где матрица

$$\hat{\mathcal{T}}(\varepsilon) = \hat{t}(\varepsilon) \hat{t}^\dagger(\varepsilon) \quad (3)$$

связана с усредненным по спину коэффициентом прохождения, $\bar{\mathcal{T}}(\varepsilon)$, формулой $\bar{\mathcal{T}}(\varepsilon) = \text{Tr}[\hat{\mathcal{T}}(\varepsilon)]/2$. Усредняя это выражение по энергии, мы получаем выражение для контактанса $G = 2(e^2/h) \langle \bar{\mathcal{T}}(\varepsilon) \rangle_\varepsilon$, и находим ток

$$eI = \frac{e^2}{h} \int_{\mu}^{\mu+eV} d\varepsilon \text{Tr} \left[\hat{\mathcal{T}}(\varepsilon) \right], \quad (4)$$

а также ФФ:

$$\mathcal{F} = \frac{\int_{\mu}^{\mu+eV} d\varepsilon \text{Tr} \left[\hat{\mathcal{T}}(1 - \hat{\mathcal{T}}) \right]}{\int_{\mu}^{\mu+eV} d\varepsilon \text{Tr}[\hat{\mathcal{T}}]}. \quad (5)$$

Амплитуды прохождения $t_{\alpha\beta}(\varepsilon)$ изменяются на энергетическом масштабе порядка расстояния между уровнями $\Delta = 2\pi v/L$. Мы сосредоточимся на наиболее интересном случае, когда выполняются условия (1). Тогда для ФФ имеем

$$\mathcal{F} = \frac{\text{Tr} \langle \hat{\mathcal{T}}(1 - \hat{\mathcal{T}}) \rangle_\varepsilon}{\text{Tr} \langle \hat{\mathcal{T}} \rangle_\varepsilon}, \quad (6)$$

где усреднение берется по узкой температурной полоске в окрестности уровня Ферми. В следующей секции мы сформулируем модель, которая позволит нам найти $\mathcal{F}$, используя формулу (6).

III. Модель. Мы рассматриваем 2D ТИ, предполагая, что уровень Ферми находится в объемной щели, так что транспорт между двумя контактами, присоединенными к системе, полностью определяется ГКС.

Простейшая матрица рассеяния контакта имеет вид

$$\hat{S}_l = \begin{pmatrix} -t & r & 0 & 0 \\ r & t & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -t & r \\ 0 & 0 & r & t \end{pmatrix}, \quad t^2 + r^2 = 1, \quad (7)$$

где два идентичных блока отвечают за два спина, причем базис выбран в соответствии со спиновой поляризацией геликоидальных состояний в точке контакта (красный и синий цвет на рис. 2).

Будем считать, что на краю ТИ находится МД, например, потенциальный диэлектрический ферромагнитный точечный контакт с большой магнитной жесткостью и магнитным моментом, направление которого зафиксировано одноосной анизотропией или тензором размагничивания ферромагнетика. Рассеяние на таком МД описывается матрицей общего вида, допускающей рассеяние назад

$$\hat{S}_M = \begin{pmatrix} \cos \theta & i \sin \theta e^{i\varphi} \\ i \sin \theta e^{-i\varphi} & \cos \theta \end{pmatrix}, \quad (8)$$

а обратным влиянием ГКС на параметры S_M можно пренебречь. Темп рассеяния назад, R_θ , определяется величиной θ : $R_\theta = \sin^2 \theta$, а фаза φ имеет смысл фазы рассеяния назад на МД.

Матрица амплитуд прохождения $\hat{t}$ из одного контакта в другой определяется следующим образом

$$\begin{pmatrix} a^\uparrow \\ a^\downarrow \end{pmatrix} = \hat{t} \begin{pmatrix} b^\uparrow \\ b^\downarrow \end{pmatrix}, \quad (9)$$

где $(b^\uparrow, b^\downarrow)$ и $(a^\uparrow, a^\downarrow)$ – амплитуды входящих (из левого контакта) и выходящих (в правый контакт) волн соответственно (см. рис. 1). Эта матрица была вычислена ранее [15]

$$\hat{t} = \frac{r^2 e^{2\pi i \phi L_1/L}}{t} \begin{pmatrix} e^{ikL_1} & 0 \\ 0 & e^{-ikL_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \hat{g} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1/t \end{pmatrix},$$

$$\hat{g} = \cos \theta \left[\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=\pm} \frac{1 + \alpha \hat{H}}{1 - t^2 e^{i(kL + \alpha 2\pi \phi_0)}} \right]. \quad (10)$$

Здесь ϕ_0 определяется соотношением

$$\cos(2\pi\phi_0) = \cos\theta \cos(2\pi\phi), \quad (11)$$

а матрица $\hat{H}$ имеет вид

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} a & be^{i\xi} \\ be^{-i\xi} & -a \end{pmatrix}, \quad (12)$$

где $\xi = \varphi - 2kx_0$, $k = \varepsilon/v_F$ – импульс электрона, а x_0 – положение магнитного дефекта, отсчитанное от левого контакта. Коэффициенты

$$a = i \frac{e^{-2\pi i\phi} - \cos(2\pi\phi_0) \cos\theta}{\cos\theta \sin(2\pi\phi_0)}, \quad (13)$$

$$b = \frac{e^{-2\pi i\phi} \tan\theta}{\sin(2\pi\phi_0)}, \quad (14)$$

связаны соотношением $a^2 + b^2 = 1$ и зависят только от силы дефекта и магнитного потока, а зависимость от энергии присутствует только в недиагональных членах $\hat{H}$ в показателях экспонент $e^{\pm i\xi}$.

IV. Вычисление ФФ. Подставляя в формулу (6) матрицу амплитуд прохождения (10) и проводя усреднение по энергии в пределе $T \gg \Delta$ можно вычислить выражение для ФФ в общем случае. Технически, при таких температурах, усреднение по энергии сводится к вычислению интеграла $\langle \dots \rangle = \frac{L}{2\pi} \int_0^{2\pi/L} dk(\dots)$ [14, 15]. Получающееся после усреднения аналитическое выражение имеет весьма громоздкий вид (подробный вывод будет представлен в другом месте), и мы приводим его в дополнительных материалах, а для прояснения физических моментов рассмотрим предельные случаи.

А. ГКС без МД. Самый простой предельный случай отвечает отсутствию МД. В этом случае электронный спин сохраняется как в процессе движения по кольцу, так и при входе или выходе из контакта. Поскольку спин сохраняется, а разные спины описываются ортогональными спинорами, то интерференционные эффекты в этом случае отсутствуют. Матрица амплитуд прохождения в этом случае имеет диагональный вид,

$$\hat{t} = \begin{pmatrix} \frac{r^2 e^{ikL_1 + i2\pi\phi L_1/L}}{1 - t^2 e^{ikL + i2\pi\phi}} & 0 \\ 0 & \frac{r^2 e^{ikL_2 - i2\pi\phi L_2/L}}{1 - t^2 e^{ikL - i2\pi\phi}} \end{pmatrix}. \quad (15)$$

Разложение входящих в диагональные члены факторов $(1 - t^2 e^{ikL \pm i2\pi\phi})^{-1}$ в ряд Тейлора по t представляет собой сумму по числу намоток.

Используя выражения (3), (6), (15) и усредняя по энергии, мы находим, что ФФ не зависит от магнитного потока и связан простой формулой с коэффициентом прохождения:

$$\mathcal{F}[t, \theta = 0, \phi] = \frac{2t^2}{(1 + t^2)^2} = \frac{1 - \tilde{T}^2}{2}. \quad (16)$$

Здесь $\tilde{T} = \langle \bar{T} \rangle_\epsilon = (1 - t^2)/(1 + t^2)$. Формула (16) представлена синей линией на рис. 3.

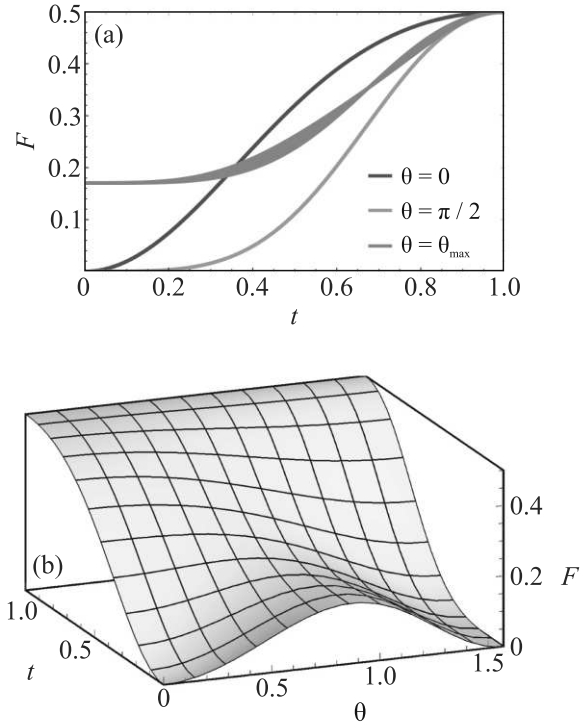


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – ФФ как функция прозрачности контакта, t , при разных значениях силы рассеяния на МД, θ . Зеленая уширенная кривая показывает зависимость $\mathcal{F}$ от t при $\theta = \theta_{\max}$. Ширина этой кривой показывает изменение $\mathcal{F}$ при изменении магнитного потока. (б) Зависимость $\mathcal{F}$ от t и θ при $\phi = 1/4$

В. Металлические контакты и сильный МД. Мы называем металлическим контакт, в котором электрон идеальным образом туннелирует в ГКС. Соответственно, $r = 1$ и, как следствие, $t = 0$ из-за унитарности матрицы рассеяния контакта. Последнее свойство означает, электрон проходит ГКС только от контакта до контакта, а намотки отсутствуют. Если на этом отрезке присутствует сильный магнитный дефект, $\theta = \pi/2$, то электрон отражается от него и не может пройти к следующему контакту. Таким образом, в этом случае только электроны, которые двигаются по нижнему краю образца (см. рис. 1), могут пройти через ГКС. Коэффициенты прохождения такой системы равны $\mathcal{T}_\uparrow = \mathcal{R}_\downarrow = 0$ и $\mathcal{T}_\downarrow = \mathcal{R}_\uparrow = 1$. Поэтому дробовой шум равен нулю

$$\mathcal{S} \propto (1 - \mathcal{T}_\uparrow)\mathcal{T}_\uparrow + (1 - \mathcal{T}_\downarrow)\mathcal{T}_\downarrow = 0, \quad (17)$$

прохождение электронов со спином “вверх” полностью заблокировано, а спин “вниз” беспрепятственно проходит через край образца. Таким образом, 2D ТИ с металлическими контактами, имеющий на краю сильный МД, является *бесшумовым идеальным спинновым фильтром*.

С. Сильный магнитный дефект в общем случае. Для случая произвольной силы связи с контактом, $0 < t < 1$, и сильной МД, $\theta = \pi/2$, матрица амплитуд прохождения легко вычисляется прямым суммированием амплитуд и имеет вид

$$\hat{t} = \frac{r^2 e^{-i2\pi\phi L_2/L + ikL}}{1 + t^4 e^{2ikL}} \begin{pmatrix} -e^{ikL_1} t^2 & i e^{ik(L_1 - 2x_0)} t \\ i t e^{-ik(L_1 - 2x_0)} & e^{-ikL_1} \end{pmatrix}. \quad (18)$$

В знаменателе магнитный поток отсутствует, потому что прохождение по ГКС с ненулевым числом намоток включает в себя только движение с возвратом к МД, причем имеется нечетное число намоток $2n + 1$, из которых $n + 1$ оборотов по часовой стрелке, а n против часовой. Пример двух процессов без переворота спина с 1 и 3 намотками представлен на рис. 4. Поскольку каждый (кроме одного избыточно-

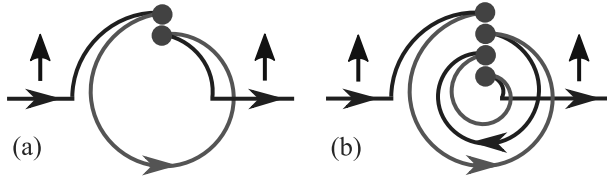


Рис. 4. (Цветной онлайн) Процессы без переворота спина с 1 и 3 намотками для случая очень сильного дефекта

го) проход по часовой стрелке сопровождается проходом против часовой стрелки, в знаменателе возникает фактор $t^2 \exp[ikL + i2\pi\phi] t^2 \exp[ikL - i2\pi\phi] = t^4 \exp[2ikL]$. В этом случае ФФ после усреднения в температурной полоске по-прежнему не зависит от магнитного потока и имеет следующий вид:

$$\mathcal{F}[t, \theta = \pi/2, \phi] = \frac{2t^4}{(1 + t^4)^2}. \quad (19)$$

Эта зависимость представлена на рис. 3 оранжевой линией.

Д. Металлические контакты и МД произвольной силы. Выше мы показали, что как в случае отсутствия МД, так и в случае очень сильного дефекта, ФФ обращается в ноль при $t = 0$, т.е. для системы с металлическими контактами (см. формулы (16) и (19), соответственно).

Рассмотрим теперь металлический контакт с $t = 0$ и предположим, что МД имеет произвольную

силу, $0 < \theta < \pi/2$. В этом случае, спины полностью разделяются, а намотки невозможны. Поэтому матрица амплитуд прохождения вычисляется тривиальным образом

$$\hat{t} = \begin{pmatrix} \cos \theta e^{ikL_1 + 2\pi\phi L_1/L} & 0 \\ 0 & e^{ikL_2 - 2\pi\phi L_2/L} \end{pmatrix}. \quad (20)$$

Соответственно, ФФ имеет вид

$$\mathcal{F}[t = 0, \theta, \phi] = \frac{\sin^2 2\theta}{4(1 + \cos^2 \theta)}. \quad (21)$$

С увеличением θ от нуля, $\mathcal{F}$ увеличивается, достигает максимума, а затем спадает и опять обращается в ноль для случая сильного дефекта. Таким образом, существует оптимальное значение силы МД, которое дает максимальное значение ФФ, $\mathcal{F}_{\max} = 3 - 2\sqrt{2} \approx 0.17$. Физически, этот случай эквивалентен случаю двух параллельных каналов – полностью баллистического и канала, сопротивление которого определяется рассеянием на дефекте. Значение $\mathcal{F}_{\max}$ получается оптимизацией выражения $T_\theta(1 - T_\theta)/(1 + T_\theta)$ по $T_\theta = \cos^2 \theta$.

Е. Общий случай. Выше мы разобрали несколько простейших предельных случаев, в которых зависимость от ϕ отсутствовала. В общем случае зависимость от потока появляется. Общая формула для $\mathcal{F}(t, \theta, \phi)$ имеет весьма громоздкий вид и мы привели ее дополнительных материалах (см. выражения (7), (8), (9), (10) в дополнительных материалах). Из этой формулы явно видна зависимость от ϕ . Например, для почти металлического контакта, $t \ll 1$, при произвольной силе рассеяния на МД, ФФ показывает слабые осцилляции с ϕ :

$$\mathcal{F}(t, \theta, \phi) \approx \frac{R_\theta(1 - R_\theta)}{2 - R_\theta} + 2t^2 + 2t^4 \frac{R_\theta(1 - R_\theta)(10 - 12R_\theta + 3R_\theta^2)}{(2 - R_\theta)^2} \cos(4\pi\phi). \quad (22)$$

Здесь $R_\theta = 1 - T_\theta = \sin^2 \theta$ – вероятность рассеяния назад на МД. Более интересен противоположный случай почти туннельного контакта $t \rightarrow 1, r \ll 1$. В этом случае,

$$\mathcal{F}(t, \theta, \phi) \approx \frac{1}{2} - \frac{r^4}{8} - r^4 \frac{3R_\theta}{4((R_\theta - 1) \cos(4\pi\phi) + R_\theta + 1)}. \quad (23)$$

Хотя для чисто туннельного контакта, $r \equiv 0$, мы получаем универсальное значение $\mathcal{F} = 1/2$, что отвечает прохождению через независимые локализованные уровни в системе [40], при отклонении r от единицы появляется зависимость $\mathcal{F}$ от потока, которая для

случая слабого дефекта, $R_\theta \ll 1$, имеет резкие резонансы малой амплитуды около $\phi = 0$ и $\phi = 1/2$.

Заметим, что зависимость $\mathcal{F}$ от магнитного поля оказывается достаточно слабой. Семейство зависимостей $\Phi\Phi$ при потоке, изменяющемся в интервале от нуля до единицы при $\theta = \theta_{\max}$, т.е. $\mathcal{F}(\theta = \theta_{\max}, t, 0 < \phi < 1)$, представлено на рис. 3 зеленой уширенной линией. Ширина этой линии показывает изменение $\mathcal{F}$ во всем релевантном интервале изменения магнитного потока. Как видно, эта ширина – существенно меньше расстояния между двумя предельными кривыми, отвечающими $\theta = 0$ и $\theta = \pi/2$. Тем не менее, эту зависимость можно выделить, изучая нормализованную величину $\mathcal{F}_{\text{norm}}(t, \theta, \phi) = [\mathcal{F}(t, \theta, \phi) - \mathcal{F}(t, \theta, 1/4)] / [\mathcal{F}(t, \theta, 0) - \mathcal{F}(t, \theta, 1/4)]$. Например, из формулы (23) при $\theta \ll 1$ получаем

$$\mathcal{F}_{\text{norm}} \approx \frac{\theta^2}{\theta^2 + \sin^2(2\pi\phi)},$$

т.е. резкие резонансы при $\phi = 0$ и $\phi = 1/2$.

Г. Сравнение со стандартным интерферометром Ааронова–Бома. Интересно сравнить полученные результаты с шумом через стандартный (не геликоидальный) бесспиновый одноканальный интерферометр Ааронова–Бома, расчет которого можно провести полностью аналогично геликоидальному случаю (кондактанс такого интерферометра обсуждался в работах [41–43]). В этой статье мы ограничимся случаем баллистического обычного интерферометра с одинаковыми плечами. Формулы для этого случая мы приводим в дополнительных материалах (более общий случай будет обсужден в другом месте). При $\phi = 0$ зависимость $\Phi\Phi$ от кондактанса дается одной и той же формулой для геликоидального и обычного интерферометра (см. формулы (16) и (S11)). Тем не менее, в обычном интерферометре зависимость от ϕ возникает даже без примесей из-за возможности рассеяния назад на контактах. Поэтому при $\phi \neq 0$ зависимости перестают совпадать, как это проиллюстрировано на рис. 5. Две разные ветки зависимости $\mathcal{F}(\tilde{T})$ возникают из-за того, что в обычном интерферометре один и тот же кондактанс можно реализовать контактами разного типа (см. панели (а) и (b) рис. S1 дополнительных материалов). Наиболее радикальное отличие возникает при $\phi = 1/2$. В этом случае, в обычном интерферометре АБ, имеется точная деструктивная интерференция для любых энергий, т.е. амплитуда прохождения тождественно равна нулю при всех энергиях, $t(\epsilon, \phi = 1/2) \equiv 0$ [38] (см. также обсуждение последствий этого тождества в работах [41, 42]). В результате, в обычном интерферометре $\mathcal{F} \rightarrow 1$ для $\delta\phi = \phi - 1/2 \rightarrow 0$ (см. формулы

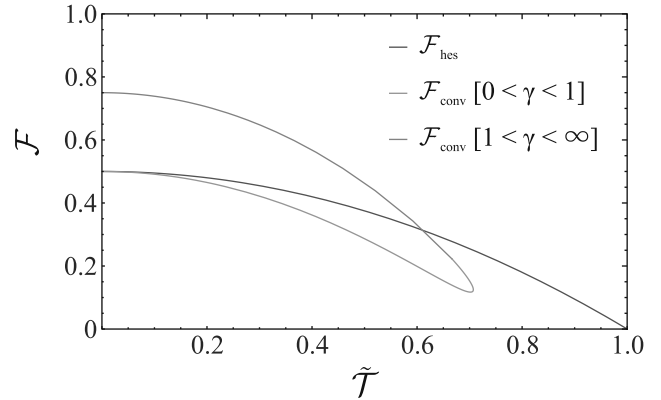


Рис. 5. (Цветной онлайн) Зависимость $\Phi\Phi$ от коэффициента прохождения интерферометра: синяя кривая – геликоидальный интерферометр без МД при изменении t в диапазоне $0 < t < 1$ (описывается формулой (16)); оранжевая и зеленая кривая отвечают одноканальному обычному интерферометру при $\phi = 0.25$ и изменении параметра туннелирования γ в диапазоне $0 < \gamma < 1$ и $1 < \gamma < \infty$, соответственно, см. дополнительные материалы. При $\phi = 0$ оранжевая и зеленая кривая “сливаются” и совпадают с синей кривой

(S5), (S7) из дополнительных материалов и обсуждение там).

В. Выводы. Важные качественные выводы и предсказания для возможных экспериментов можно сделать, анализируя рис. 3. Видно, что для металлического контакта, введение МД существенно увеличивает шум, а для туннельных контактов с очень малой связью зависимость от силы дефекта слабая и, более того, имеет другой знак, т.е. МД слегка уменьшает $\Phi\Phi$.

Подводя итог, нами получено выражение для $\Phi\Phi$ в двухтерминальной геометрии для тока, протекающего по краю 2D ТИ с МД. Проведен анализ полученного выражения в разных предельных случаях в зависимости от силы рассеяния на магнитном дефекте и прозрачности контактов. Также изучена зависимость $\mathcal{F}$ от магнитного поля.

Мы благодарны И. С. Бурмистрову за плодотворное обсуждение.

Финансирование работы. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант # 20-12-00147-П) (Д. Н. Аристов, В. Ю. Качоровский). Вычисление фактора Фано в общем случае (секция IV Е основного текста и файл с дополнительными материалами) поддержано грантом Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук (проект # МК-2918.2022.1.2) (Р. А. Ниязов). Также работа Р. А. Ниязова частично

выполнена при финансовой поддержке Фонда развития теоретической физики и математики “БАЗИС”.

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

1. B. Bernevig and T. Hughes, *Topological Insulators and Topological Superconductors*, Princeton University Press, Princeton (2013).
2. M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045 (2010).
3. X.-L. Qi and S.-C. Zhang, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1057 (2011).
4. C. L. Kane and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 226801 (2005).
5. B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S. C. Zhang, *Science* **314**, 1757 (2006).
6. M. König, S. Wiedmann, C. Brune, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, *Science* **318**, 766 (2007).
7. A. Roth, C. Brüne, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, J. Maciejko, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, *Science* **325**, 294 (2009).
8. G. M. Gusev, Z. D. Kvon, O. A. Shegai, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretzky, and J. C. Portal, *Phys. Rev. B* **84**, 121302 (2011).
9. C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, E. M. Hankiewicz, L. W. Molenkamp, J. Maciejko, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, *Nat. Phys.* **8**, 485 (2012).
10. A. Kononov, S. V. Egorov, Z. D. Kvon, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretzky, and E. V. Deviatov, *JETP Lett.* **101**, 814 (2015).
11. P. Delplace, J. Li, and M. Büttiker, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 246803 (2012).
12. F. Dolcini, *Phys. Rev. B* **83**, 165304 (2011).
13. G. Gusev, Z. Kvon, O. Shegai, N. Mikhailov, and S. Dvoretzky, *Solid State Commun.* **205**, 4 (2015).
14. R. A. Niyazov, D. N. Aristov, and V. Y. Kachorovskii, *Phys. Rev. B* **98**, 045418 (2018).
15. R. A. Niyazov, D. N. Aristov, and V. Y. Kachorovskii, *npj Comput. Mater.* **6** (2020).
16. R. A. Niyazov, D. N. Aristov, and V. Y. Kachorovskii, *Phys. Rev. B* **103**, 125428 (2021).
17. R. A. Niyazov, D. N. Aristov, and V. Y. Kachorovskii, *JETP Lett.* **113**, 689 (2021).
18. R. A. Niyazov, D. N. Aristov, and V. Y. Kachorovskii, *Phys. Rev. B* **108**, 075424 (2023).
19. R. A. Niyazov, D. N. Aristov, and V. Y. Kachorovskii, *JETP Lett.* **118**, 376 (2023).
20. N. Lezmy, Y. Oreg, and M. Berkooz, *Phys. Rev. B* **85**, 235304 (2012).
21. A. Del Maestro, T. Hyart, and B. Rosenow, *Phys. Rev. B* **87**, 165440 (2013).
22. J. M. Edge, J. Li, P. Delplace, and M. Büttiker, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 246601 (2013).
23. F. Dolcini, *Phys. Rev. B* **92**, 155421 (2015).
24. E. S. Tikhonov, D. V. Shovkun, V. S. Khrapai, Z. D. Kvon, N. N. Mikhailov, and S. A. Dvoretzky, *JETP Lett.* **101**, 708 (2015).
25. J. I. Väyrynen and L. I. Glazman, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 106802 (2017).
26. S. U. Piatrusha, L. V. Ginzburg, E. S. Tikhonov, D. V. Shovkun, G. Koblmüller, A. V. Bubis, A. K. Grebenko, A. G. Nasibulin, and V. S. Khrapai, *JETP Lett.* **108**, 71 (2018).
27. K. E. Nagaev, S. V. Remizov, and D. S. Shapiro, *JETP Lett.* **108**, 664 (2018).
28. P. D. Kurilovich, V. D. Kurilovich, I. S. Burmistrov, Y. Gefen, and M. Goldstein, *Phys. Rev. Lett.* **123**, 056803 (2019).
29. V. D. Kurilovich, P. D. Kurilovich, I. S. Burmistrov, and M. Goldstein, *Phys. Rev. B* **99**, 085407 (2019).
30. B. V. Pashinsky, M. Goldstein, and I. S. Burmistrov, *Phys. Rev. B* **102**, 125309 (2020).
31. C.-H. Hsu, P. Stano, J. Klinovaja, and D. Loss, *Semicond. Sci. Tech.* **36**, 123003 (2021).
32. B. Probst, P. Virtanen, and P. Recher, *Phys. Rev. B* **106**, 085406 (2022).
33. S. Munyan, A. Rashidi, A. C. Lygo, R. Kealhofer, and S. Stemmer, *Nano Lett.* **23**, 5648 (2023).
34. D. V. Khomitsky, A. A. Konakov, and E. A. Lavrukina, *J. Phys. Condens. Matter* **34**, 405302 (2022).
35. V. A. Sablikov and A. A. Sukhanov, *Phys. Rev. B* **103**, 155424 (2021).
36. P. P. Aseev and K. E. Nagaev, *Phys. Rev. B* **94**, 045425 (2016).
37. E. Olshanetsky, G. Gusev, A. Levin, Z. Kvon, and N. Mikhailov, *Phys. Rev. Lett.* **131**, 076301 (2023).
38. M. Büttiker, Y. Imry, and M. Y. Azbel, *Phys. Rev. A* **30**, 1982 (1984).
39. M. J. M. de Jong and C. W. J. Beenakker, in *Mesoscopic Electron Transport*, NATO ASI Series E, ed. by L. Sohn, L. Kouwenhoven, and G. Schön, Kluwer Academic Publishing, Dordrecht (1997), v. 345, p. 225.
40. Y. Blanter and M. Büttiker, *Phys. Rep.* **336**, 1 (2000).
41. A. P. Dmitriev, I. V. Gornyi, V. Y. Kachorovskii, and D. G. Polyakov, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 036402 (2010).
42. A. P. Dmitriev, I. V. Gornyi, V. Y. Kachorovskii, D. G. Polyakov, and P. M. Shmakov, *JETP Lett.* **100**, 839 (2015).
43. A. P. Dmitriev, I. V. Gornyi, V. Y. Kachorovskii, and D. G. Polyakov, *Phys. Rev. B* **96**, 115417 (2017).

Особенности квантования кондактанса многоканальных квантовых точечных контактов

Д. А. Похабов^{†*1)}, А. Г. Погосов^{†*}, А. А. Шевырин[†], Е. Ю. Жданов^{†*}, А. К. Бакаров^{†*}

[†]Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия

^{*}Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 18 января 2024 г.

После переработки 6 февраля 2024 г.

Принята к публикации 7 февраля 2024 г.

В квантовых точечных контактах с боковыми затворами реализован и изучен режим многоканального электронного транспорта с независимым квантованием кондактанса отдельных каналов. Моделирование кондактанса суммой квантующихся кондактансов позволило воспроизвести полученную сложную экспериментальную картину зависимости кондактанса от суммы и разности напряжений на затворах в этом режиме. Рассмотренная модель воспроизводит следующие экспериментально наблюдаемые особенности квантования кондактанса: отсутствие некоторых плато, прыжки кондактанса на $4e^2/h$ и на величины, отличные от $2e^2/h$, появление аномальных плато при значениях, не кратных $2e^2/h$, эволюция аномальных плато при изменении разности затворных напряжений и низкая видность некоторых плато. Исследование показывает, что за нетривиальной экспериментально наблюдаемой картиной кондактанса квантовых точечных контактов может скрываться заранее не очевидная многоканальность.

DOI: 10.31857/S1234567824050082, EDN: ECSWKZ

1. Введение. Как известно, одночастичная модель электронного транспорта в квазиодномерных проводниках предсказывает квантование кондактанса в единицах $2e^2/h$. Явление квантования кондактанса экспериментально наблюдается в квантовых точечных контактах (КТК) – сужениях двумерного электронного газа (ДЭГ) [1, 2]. Типичная зависимость кондактанса КТК от затворного напряжения представляет собой ступенчатую кривую с плато при значениях, кратных $2e^2/h$. Отклонения от типичной зависимости, такие как, например, плато при значениях, не кратных $2e^2/h$, рассматриваются как аномалии кондактанса, происхождение которых заслуживает изучения. Одним из наиболее известных, но не единственным примером таких аномалий кондактанса является 0.7-аномалия, наблюдающаяся в виде плато при значениях, близких к $0.7 \times 2e^2/h$, изучению которой посвящено огромное количество теоретических и экспериментальных работ [3–12]. Установлено, что причина ее появления связана с электрон-электронным ($e-e$) взаимодействием [13, 14]. Другие интересные особенности в измерениях кондактанса КТК, заслуживающие упоминания, возникают при достаточно низкой концентрации электронов, когда $e-e$ взаимодействие начинает играть существенную роль, и в канале КТК формируется одномер-

ный (1D) вигнеровский кристалл. Структурный фазовый переход от одномерной электронной цепочки к квазиодномерной зигзагообразной структуре в таком кристалле, т.н. переход “струна-зигзаг” [15–19], характеризуется удвоенным прыжком кондактанса на $4e^2/h$ [20–25]. Другие аномалии кондактанса, такие как $0.15 \times 2e^2/h$, $0.25 \times 2e^2/h$, $0.85 \times 2e^2/h$, наблюдающиеся в нелинейном режиме при ненулевом постоянном напряжении между истоком и стоком КТК, связаны с эффектами спин-орбитального взаимодействия [26–28]. Эти эффекты ответственны также за плато $0.5 \times 2e^2/h$, наблюдающееся в нулевом магнитном поле [29, 30]. Таким образом, аномалии кондактанса обычно связаны с эффектами взаимодействия и выходят за рамки одночастичной модели. Следует отметить, что общепринято установленных физических механизмов перечисленных аномалий до сих пор нет, а имеющиеся модели остаются дискуссионными.

В данной статье мы показываем, что возникновение некоторых аномалий кондактанса, наблюдающихся в эксперименте, все же может быть объяснено в рамках одночастичной модели, в то время как роль взаимодействия сводится к формированию многоканального самосогласованного ограничивающего потенциала, что, в свою очередь, приводит к образованию нескольких проводящих каналов внутри литографически одиночного микросужения КТК. Учи-

¹⁾e-mail: pokhabov@isp.nsc.ru

тывая, что в рассматриваемом ниже эксперименте таких каналов два, и моделируя общий кондактанс как сумму кондактансов двух каналов, мы воспроизводим многие важные особенности кондактанса, наблюдающиеся в эксперименте, такие как отсутствие некоторых плато, прыжки кондактанса на $4e^2/h$ и на величины, не кратные $2e^2/h$, недостаточная видность (контраст) квантования кондактанса, появление аномальных плато и их эволюция при изменении разности затворных напряжений. Результаты моделирования сравниваются с экспериментальными данными, иллюстрирующими вышеперечисленные особенности. Следует отметить, что возникновение нескольких проводящих каналов внутри одиночного КТК траншейного типа было экспериментально обнаружено ранее [31–35]. Однако природа упомянутых выше особенностей квантования кондактанса в этом контексте до сих пор не обсуждалась.

Возникновение нескольких каналов внутри одиночного КТК может быть обусловлено формированием многоямного потенциала. Физические механизмы, ответственные за его формирование, обсуждались ранее [36, 37], хотя остаются не до конца выясненными. Формирование многоямного потенциала может быть обусловлено самосогласованным перераспределением зарядов в гетероструктуре (электронов в ДЭГ и заряда доноров), минимизирующим энергию системы. При охлаждении образца распределение заряда на донорах замораживается, фиксируя реализовавшийся многоямный потенциал для электронов ДЭГ, в то время как электроны остаются вырожденными и способными изменять свое распределение под действием электрического поля затворов. Самосогласованные численные расчеты подтверждают, что $e-e$ отталкивание в мелком ограничивающем потенциале может разбивать проводящий канал на два отдельных канала [38, 39].

2. Детали эксперимента. Экспериментальные образцы изготовлены из гетероструктур GaAs/AlGaAs, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии. Сначала на подложке GaAs (001) выращивался жертвенный слой $\text{Al}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{As}$ толщиной 400 нм, а поверх него выращивалась сверхрешеточная структура GaAs/AlAs толщиной 166 нм, содержащая ДЭГ в GaAs слое толщиной 13 нм, залегающем на глубине 90 нм от поверхности и представляющем собой прямоугольную симметричную квантовую яму для электронов. Квантовая яма с ДЭГ окружена сверхрешеточными слоями, содержащими δ -слои донорной примеси кремния на расстоянии 30 нм симметрично по обе стороны от ямы. В сверхрешеточных слоях вблизи δ -слоев

легирующих донорных примесей присутствуют массивные низкоподвижные электроны в X-долинах, которые не вносят вклад в проводимость при низких температурах, но сглаживают флуктуации потенциала случайно расположенных донорных примесей [40]. Гетероструктура содержит слой $\text{Al}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{As}$, который используется для создания подвешенных, т.е. отделенных от подложки, наноструктур [41–43]. Подвешивание осуществлялось путем селективного вытравливания жертвенного слоя из-под наноструктуры водным раствором плавиковой кислоты через траншеи, плазмохимически вытравленные в верхних слоях гетероструктуры. Концентрация и подвижность электронов в ДЭГ при температуре 4.2 К составляют $(6-7) \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ и $1 \times 10^6 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$, соответственно. КТК изготавливались травлением литографических траншей шириной 150 нм и глубиной 170 нм, отделяющих микросужение от двух симметричных боковых затворов. Траншеи формировались с помощью электронной литографии и анизотропного реактивного ионного травления в плазме BCl_3 . Для литографии использовался электронный резист полиметилметакрилат (ПММА) толщиной 250 нм. Резист экспонировался пучком электронов с энергией 20 кэВ. Литографическая ширина КТК составляет 900 нм. Траншеи имеют форму дуг окружности с радиусом 1 мкм. КТК имеют плавные входы и выходы, удовлетворяющие известным критериям адиабатичности [44, 45]. СЭМ-изображение подвешенного КТК представлено на вставке к рис. 1. Образцы были снабжены Au/Ni/Ge омическими контактами в области истока, стока и боковых затворов. Двухконтактные измерения кондактанса проводились методом синхронного детектирования, используя возбуждающее напряжение V_{SD} с амплитудой 30 мкВ и частотой 70 Гц при температурах 4.2 и 1.6 К. Кондактанс G измерялся как функция постоянных напряжений V_G^{I} и V_G^{II} , приложенных к двум боковым затворам. В эксперименте затворные напряжения разворачивались синхронно и серия характеристик $G(V_{\Sigma})$, где $V_{\Sigma} = V_G^{\text{I}} + V_G^{\text{II}}$, измерялась при различных значениях разности затворных напряжений $V_{\Delta} = V_G^{\text{I}} - V_G^{\text{II}}$. В данной статье представлены результаты экспериментальных измерений кондактанса двух похожих подвешенных образцов, КТК-1 и КТК-2, изготовленных из гетероструктур, выращенных в разных эпитаксиальных циклах. Как будет показано ниже, эти КТК отличались реализацией двухъямного ограничивающего потенциала: в КТК-1 он был симметричным, а в КТК-2 – асимметричным.

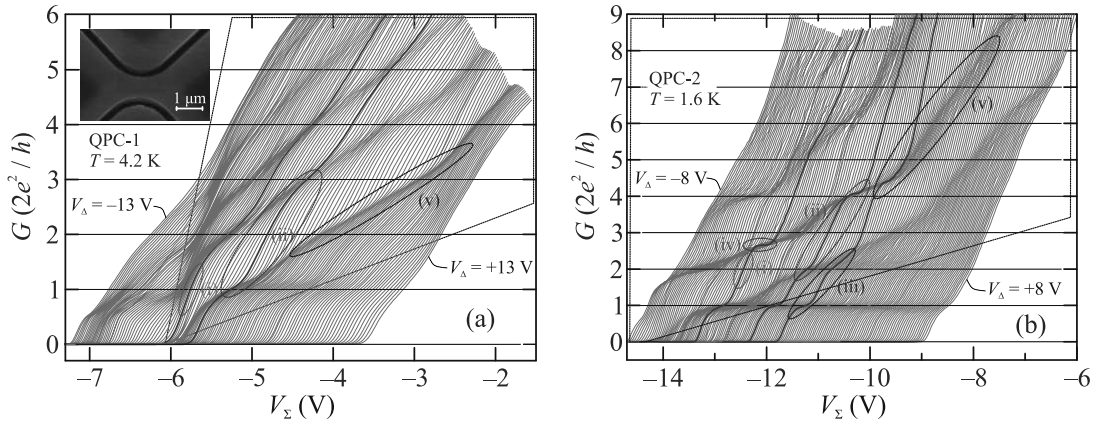


Рис. 1. (Цветной онлайн) Экспериментально измеренные серии затворных характеристик $G(V_g)$ при различных значениях разности затворных напряжений V_d : (а) – в КТК-1 при $T = 4.2$ К и (б) в КТК-2 при $T = 1.6$ К. Кривые смещены на 25 мВ друг относительно друга в горизонтальном направлении для удобства. Правые жирные кривые оставлены несмещенными. Показаны примеры особенностей кондактанса, таких как (i) отсутствие некоторых ступеней, (ii) прыжки кондактанса на $4e^2/h$, (iii) прыжки на величины, не кратные $2e^2/h$, (iv) аномальные плато при значениях, не кратных $2e^2/h$, (v) эволюция, т.е. плавное изменение значений плато кондактанса от кривой к кривой. Пунктирными линиями ограничены области наложения двух квантующихся кондактансов параллельных каналов. На вставке приведено СЭМ-изображение подвешенного КТК.

3. Экспериментальные результаты. Серии затворных характеристик кондактанса $G(V_g)$ двух разных КТК показаны на рис. 1. Каждая кривая в серии соответствует различным значениям разности затворных напряжений V_d . При определенных значениях затворных напряжений отчетливо видны плато, соответствующие разным значениям кондактанса, в том числе кратным $2e^2/h$. Однако кривые имеют более сложный вид, чем ожидаемая последовательность ступеней высотой $2e^2/h$. Для удобства некоторые затворные характеристики на рис. 1 выделены цветом и показаны жирными линиями. Можно заметить следующие особенности кондактанса, наблюдающиеся в эксперименте: (i) отсутствие некоторых ступеней, (ii) прыжки кондактанса на $4e^2/h$, (iii) прыжки на величины, не кратные $2e^2/h$, (iv) возникновение аномальных плато при значениях, не кратных $2e^2/h$, (v) плавное изменение их значений от кривой к кривой и (vi) недостаточная видность отдельных плато. Примеры перечисленных особенностей выделены и пронумерованы на рис. 1. Далее в тексте статьи при обсуждении тех или иных особенностей кондактанса мы будем использовать приведенную здесь нумерацию.

Ниже мы показываем, что перечисленные особенности кондактанса могут быть результатом наложения квантующихся кондактансов параллельных проводящих каналов.

4. Модель. Рассмотрим сначала случай КТК с одним проводящим каналом. Для построения зави-

симостей $G(V_g)$ кондактанс G и затворное напряжение V_g выразим через химический потенциал μ , который, как и другие энергетические величины, будем отсчитывать от значения химического потенциала при нулевом V_g . Зависимость $G(\mu)$ является последовательностью температурно размытых ступеней величиной $2e^2/h$, которая описывается модельной функцией:

$$G(\mu) = -2e^2/h \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_i \Theta(E - E_i) \frac{\partial f}{\partial E} dE,$$

где $\Theta(E)$ – функция Хевисайда, E_i – дно i -й подзоны размерного квантования, а $f(E, \mu) = (1 + \exp(\frac{E - \mu}{kT}))^{-1}$ – функция Ферми²⁾. Зависимость $V_g(\mu)$ находится как сумма изменений химического и электрического потенциалов при приложении напряжения: $V_g = \mu/e - Q/C_g$, где Q – индуцированный заряд, а C_g – геометрическая емкость между затвором и проводящим каналом КТК, в рамках нашей модели не зависящая от V_g . Заряд Q будем рассчитывать как $Q(\mu) = -e \int_{-\infty}^{+\infty} D(E)[f(E, \mu) - f(E, 0)] dE$, рассматривая КТК как квазиодномерную систему длины L с плотностью состояний $D(E) = L \frac{\sqrt{2m}}{\pi \hbar} \sum_i \frac{1}{\sqrt{E - E_i}}$.

²⁾ При достаточно низких температурах размытие уровней определяется временем прохождения электроном седлового потенциала адиабатического сужения (таулесовским временем), и тогда роль эффективной температуры kT_{eff} играет величина $\hbar \omega_x / 2\pi$, где ω_x описывает форму потенциала в направлении протекания тока [45].

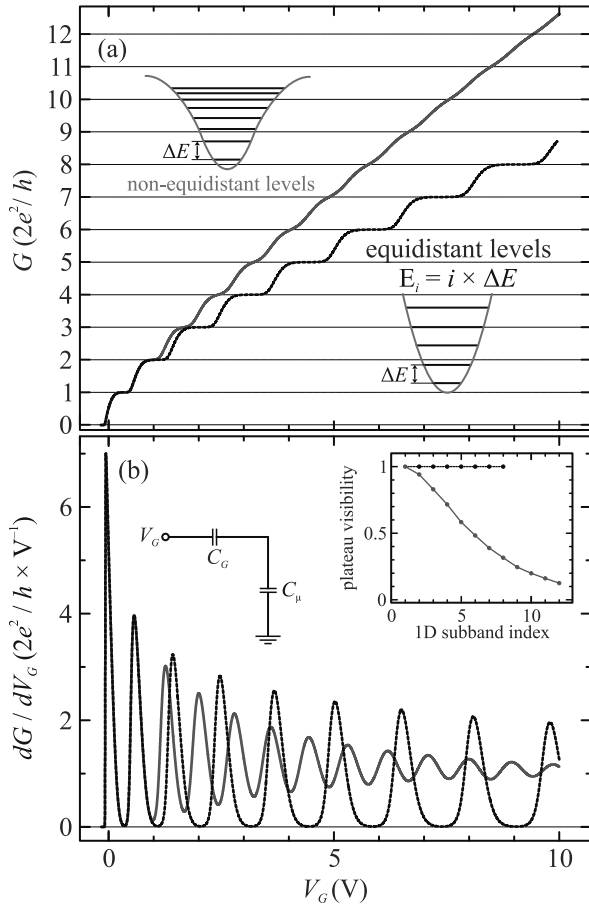


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Примеры графиков модельной функции, описывающей кондактанс одноканального КТК $G(V_G)$, заданной выражением (2), и (б) – соответствующий ему транскондактанс $g(V_G) = dG/dV_G$ для эквидистантной ($\alpha = 1$) и сгущающейся ($\alpha = 1/3$) последовательности уровней размерного квантования, заданной выражением $E_i = \Delta E \frac{i^\alpha - 1}{2\alpha - 1}$, при параметрах, близких к экспериментальным: $T = 4.2$ К и $\Delta E = 6$ мэВ, $C_g = 0.01 \times C_{\mu 0}$. На вставках схематически показаны характерные виды ограничивающих потенциалов и последовательность уровней размерного квантования в них, а также эквивалентная электрическая схема и график видности плато, рассчитанной по формуле (4), как функции номера подзоны

Методика расчета может быть проиллюстрирована эквивалентной схемой, изображенной на вставке к рис. 2б, где полная (не дифференциальная) квантовая емкость $C_\mu = -Qe/\mu$ включена последовательно с геометрической C_g . Итоговые выражения для V_G и G представим в следующем виде:

$$V_G(\eta) = \frac{\Delta E}{e} \left[\eta + \frac{C_{\mu 0}}{C_g} (q(\eta) - q(0)) \right], \quad (1)$$

$$G(\eta) = \frac{2e^2}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_i \Theta(\varepsilon - \varepsilon_i) \frac{\Delta E/4kT}{\cosh^2((\varepsilon - \eta) \frac{\Delta E}{2kT})} d\varepsilon, \quad (2)$$

где ΔE – характерный энергетический масштаб, в качестве которого мы будем рассматривать межподзонный интервал $E_2 - E_1$, $\eta = \mu/\Delta E$ – нормированный химический потенциал, $C_{\mu 0} = \frac{2e^2 L}{\pi h} \sqrt{\frac{2m}{\Delta E}}$ – характерный масштаб квантовой емкости, $\varepsilon_i = E_i/\Delta E$ – нормированные уровни энергии, а величина $q(\eta)$, имеющая смысл обезразмеренного заряда, выражается следующим образом:

$$q(\eta) = \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_i \Theta(\varepsilon - \varepsilon_i) \sqrt{\varepsilon - \varepsilon_i} \frac{\Delta E/4kT}{\cosh^2((\varepsilon - \eta) \frac{\Delta E}{2kT})} d\varepsilon. \quad (3)$$

Примеры рассчитанных таким образом зависимостей $G(V_G)$ представлены на рис. 2а. Заметим, что в случае эквидистантных уровней размерного квантования E_i переходы между плато на расчетных графиках $G(V_G)$ неперiodичны по V_G . Экспериментальные же результаты, напротив, демонстрируют относительно периодические вдоль оси V_G ступени кондактанса (как и зависимости, приведенные во многих других работах [46–50]). В дальнейшем, чтобы приблизить условия моделирования к экспериментальным, мы будем считать, что уровни размерного квантования E_i сгущаются с ростом i (случай параболической потенциальной ямы “с размягчением”): $E_i = \Delta E \frac{i^\alpha - 1}{2\alpha - 1} + E_1$. Затворные характеристики, рассчитанные для такого случая при $\alpha = 1/3$ (см. рис. 2а), помимо почти эквидистантных по V_G ступеней кондактанса, демонстрируют усиленное сглаживание верхних плато по сравнению с нижними, что также лучше соответствует эксперименту.

На рисунке 2б показан рассчитанный транскондактанс, то есть производная кондактанса по затворному напряжению $g = \partial G/\partial V_G$ для затворных характеристик, показанных на рис. 2а. Транскондактанс представляет собой осциллирующую функцию с плавно уменьшающейся амплитудой осцилляций при увеличении числа заполненных 1D подзон. Амплитуда осцилляций транскондактанса уменьшается за счет увеличения квантовой емкости относительно геометрической и, следовательно, уменьшения параметра C_g/C_μ , который определяет зависимость $V_G(\mu)$ (см. выражение (1)). Однако, в случае сгущающейся с ростом i последовательности уровней, есть другой существенный фактор, влияющий на квантование: по мере заполнения 1D подзон уменьшается параметр $(E_{i+1} - E_i)/kT$, в результате чего значения в максимумах и минимумах

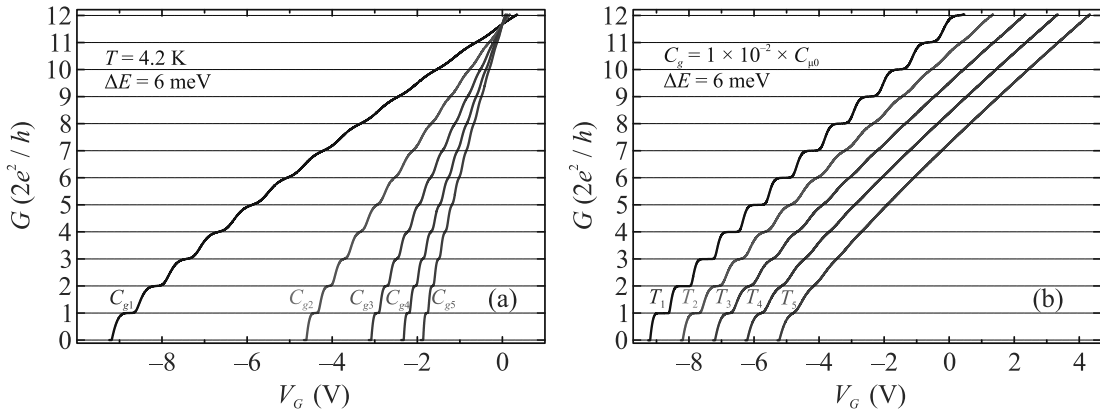


Рис. 3. (Цветной онлайн) Примеры графиков модельной функции, описывающей кондактанс одноканального КТК $G(V_G)$, при различных значениях: (a) – геометрической емкости: $C_{g1} = 0.01 \cdot C_{\mu 0}$; $C_{g2} = 0.02 \cdot C_{\mu 0}$; $C_{g3} = 0.03 \cdot C_{\mu 0}$; $C_{g4} = 0.04 \cdot C_{\mu 0}$; $C_{g5} = 0.05 \cdot C_{\mu 0}$ и (b) – температуры $T_1 = 1.6$ К; $T_2 = 4.2$ К; $T_3 = 6.0$ К; $T_4 = 8.0$ К; $T_5 = 10.0$ К

транскондактанса приближаются друг к другу, а ступени кондактанса сглаживаются и становятся менее различимыми. Степень различимости плато по аналогии с интерференционными явлениями можно характеризовать видностью:

$$\gamma = \frac{g_{\max} - g_{\min}}{g_{\max} + g_{\min}}, \quad (4)$$

где $g_{\max}$ и $g_{\min}$ – значения транскондактанса в максимуме и следующим за ним минимуме. Видность γ принимает значения в диапазоне $0 \leq \gamma \leq 1$. В случае эквидистантных уровней, определенная таким образом видность не уменьшается при достаточной низкой температуре $kT \ll \Delta E$. В случае же сгущающейся последовательности уровней, видность падает с ростом числа заполненных подзон. Видность для случаев эквидистантных и сгущающихся уровней показана на вставке к рис. 2b.

Влияние параметров $C_g/C_{\mu 0}$ и T на вид затворных характеристик кондактанса $G(V_G)$ для КТК с $\Delta E = 6$ мэВ и со сгущающейся с ростом i последовательности уровней E_i проиллюстрировано на рис. 3. Геометрическая емкость определяет период повторения плато вдоль оси V_G : чем меньше емкость, тем большие изменения затворного напряжения требуются, чтобы заполнить 1D подзону. Температура довольно быстро разрушает квантование кондактанса: при $T = 10$ К, различимы только первые три плато, хотя соответствующая данной температуре тепловая энергия $kT \approx 0.87$ мэВ мала по сравнению с 4-м межподзонным расстоянием, $(E_5 - E_4)/kT \approx 3.2$, и не превышает межподзонные расстояния вплоть до 25-й подзоны.

Перейдем к случаю КТК с двумя параллельными каналами и с двумя затворами, на которые поданы

напряжения V_G^I и V_G^{II} . Электростатическое взаимодействие между проводящими каналами и ближайшими к ним затворами будем феноменологически описывать геометрическими емкостями $C_g^{I,II}$, а взаимодействие между каналами – емкостью C_{int} . Все прочие емкости, кроме квантовых $C_{\mu}^{I,II}$ будем считать пренебрежимо малыми. Эквивалентная электрическая схема показана на вставке к рис. 4b. Значения емкостей выбраны из сравнения с экспериментом. Пренебрежем также туннелированием между каналами и положим расстояние между уровнями $E_{i+1} - E_i$, независимым от $V_G^{I,II}$. Считая системы уровней E_i одинаковыми для обоих каналов, мы вычислили затворные напряжения $V_G^{I,II}$ как функции безразмерных химических потенциалов $\eta^{I,II}$ следующим образом:

$$V_G^{I,II} = \frac{\Delta E}{e} \left[\left(1 + \frac{C_{\text{int}}}{C_g^{I,II}} \right) \eta^{I,II} - \frac{C_{\text{int}}}{C_g^{I,II}} \eta^{II,I} + \frac{C_{\mu 0}}{C_g^{I,II}} (q(\eta^{I,II}) - q(0)) \right], \quad (5)$$

а кондактанс – как сумму кондактансов двух каналов $G_I(\eta^I) + G_{II}(\eta^{II})$, определяемых зависимостями вида (2). При этом мы полагаем, что электрохимический потенциал одинаков в обоих каналах. В результате, были рассчитаны затворные характеристики двухканального КТК $G(V_{\Sigma}, V_{\Delta}) = G_I + G_{II}$ при различных значениях суммы $V_{\Sigma} = V_G^I + V_G^{II}$ и разности $V_{\Delta} = V_G^I - V_G^{II}$ затворных напряжений.

4.1. Симметричные каналы. Рассмотрим частный случай, когда емкости между каналами и ближайшими к ним затворами одинаковы: $C_g^I = C_g^{II}$. В этом случае кондактансы обоих каналов квантуются с приблизительно равными периодами повторе-

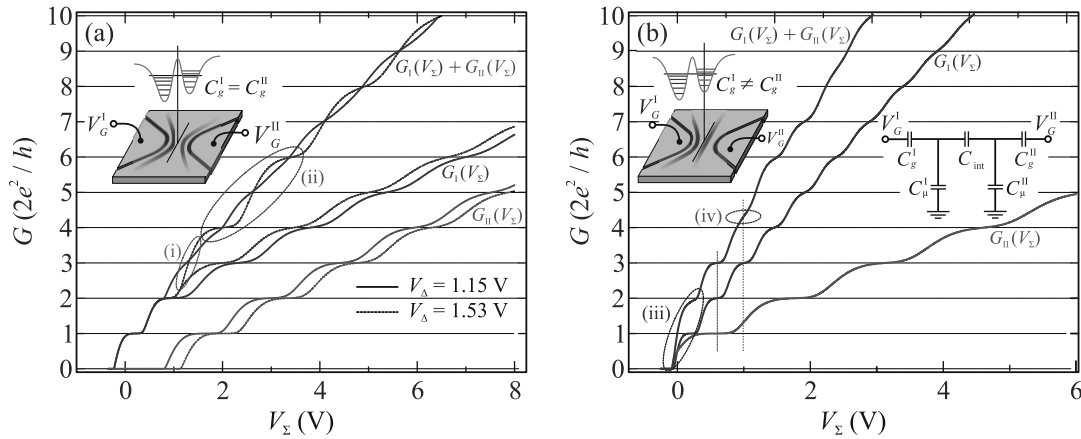


Рис. 4. (Цветной онлайн) (а) – Примеры рассчитанных затворных характеристик кондактанса $G_I(V_\Sigma)$, $G_{II}(V_\Sigma)$ и их суммы $G_I(V_\Sigma) + G_{II}(V_\Sigma)$ при значениях параметров $C_g^I = C_g^{II} = 0.01 \cdot C_{\mu 0}$, $C_{int} = 0.1 \cdot C_{\mu 0}$, $\Delta E = 6$ мэВ, $T = 4.2$ К, $V_\Delta = 1.15$ В (сплошная линия) и 1.53 В (пунктирная линия). Показаны примеры особенностей кондактанса: (i) отсутствие плато при значении, кратном $2e^2/h$, (ii) прыжок кондактанса на $4e^2/h$. Вставка иллюстрирует симметричное расположение каналов в КТК и возможный профиль ограничивающего потенциала. (б) – Графики $G_I(V_\Sigma)$, $G_{II}(V_\Sigma)$ и их суммы $G_I(V_\Sigma) + G_{II}(V_\Sigma)$ при значениях $C_g^I = 0.01 \cdot C_{\mu 0}$, $C_g^{II} = 0.035 \cdot C_{\mu 0}$. Показаны примеры особенностей кондактанса: (iii) прыжок кондактанса на величину, не кратную $2e^2/h$ и (iv) аномальное плато при значении, не кратном $2e^2/h$. Вставки иллюстрируют асимметричное расположение каналов в КТК и возможный профиль ограничивающего потенциала, а также эквивалентную электрическую схему моделируемого двухканального КТК

ния плато. Такая ситуация реализуется, когда, например, в КТК имеется симметричный двухъямный потенциал и два проводящих канала расположены симметрично относительно середины КТК. Приложение асимметричного напряжения между затворами V_Δ приводит к относительному смещению одного потенциального минимума относительно другого по энергии. Этот случай схематически проиллюстрирован на вставке к рис. 4а. Примеры графиков кондактансов отдельных каналов $G_I(V_\Sigma)$, $G_{II}(V_\Sigma)$ и их суммы $G_I(V_\Sigma) + G_{II}(V_\Sigma)$ при различных значениях V_Δ показаны на рис. 4а. Видно, что суммарный кондактанс представляет собой ступенчатую функцию с плато при значениях, кратных $4e^2/h$, т.е. демонстрирует удвоение степеней кондактанса. При этом период повторения плато вдоль оси V_Σ совпадает с периодом повторения плато кондактанса отдельных каналов. График суммарного кондактанса в случае симметричных каналов демонстрирует следующие особенности, наблюдающиеся в эксперименте: (i) отсутствие некоторых (нечетных) плато при значениях, кратных $2e^2/h$ и (ii) прыжки кондактанса на $4e^2/h$. Обратим внимание так же на то, что видность плато суммарного кондактанса в отличие от кондактанса отдельных каналов сильно зависит от V_Δ (см. рис. 4а). Видность плато, определяемая выражением (4), максимальна, когда плато кондактансов двух каналов совпадают по V_Σ (штриховая линия на рис. 4а), и минимальна, когда центр плато кондактанса

одного канала накладываются на область роста кондактанса другого канала (пунктирная линия на рис. 4а). В последнем случае, плато оказываются заметно размытыми, что объясняет (vi) ухудшение видности плато.

Таким образом, рассмотрение случая двух симметрично расположенных каналов позволяет воспроизвести (i) отсутствие некоторых плато при значениях, кратных $2e^2/h$ и (ii) прыжки кондактанса на $4e^2/h$, наблюдающиеся в экспериментально измеренных сериях затворных характеристик КТК-1, показанных на рис. 1а. Рассмотренный случай двух симметричных каналов наиболее близко соответствует экспериментальным данным, полученным в образце КТК-1. Наличие двух симметрично расположенных каналов в этом образце подтверждается также наблюдением двух одноканальных областей (левая и правая области графика на рис. 1а) и двухканальной области (средняя область графика, ограниченная пунктирной линией, на рис. 1а). При больших абсолютных значениях разности затворных напряжений V_Δ только один из двух каналов в КТК-1 проводит ток, в то время как другой перестает проводить и суммарный кондактанс равен кондактансу одного из каналов.

4.2. Асимметричные каналы. Рассмотрим общий случай асимметричных каналов. При этом емкости между каналами и ближайшими к ним затворами неодинаковы: $C_g^I \neq C_g^{II}$. В этом случае общий

кондактанс двухканального КТК определяется суммой двух кондактансов, квантующихся с разными периодами. В транскондактансе можно ожидать биений с периодически меняющейся видностью. Но, пожалуй, самое интересное в этом случае, – это возникновение аномальных плато кондактанса при значениях, не кратных $2e^2/h$. Пример графиков кондактанса двух каналов и их суммы показан на рис. 4б. Видно, что когда плато кондактанса двух каналов накладываются друг на друга (вертикальная штриховая линия на рис. 4б), возникают обычные плато, кратные $2e^2/h$. Когда же плато одного канала накладываются на области роста кондактанса второго канала (вертикальная пунктирная линия на рис. 4б), возникают аномальные плато, не кратные $2e^2/h$. Следует заметить также, что видность аномальных плато ниже обычных.

Таким образом, рассмотрение случая двух параллельных каналов с квантующимися кондактансами, позволяет воспроизвести следующие экспериментально наблюдаемые особенности кондактанса: (iii) прыжки на величины, не кратные $2e^2/h$, (iv) возникновение аномальных плато при значениях, не кратных $2e^2/h$. Рассмотренный случай двух асимметричных каналов наиболее близко соответствует экспериментальным данным, полученным в образце КТК-2. Асимметрия каналов в этом образце подтверждается также наблюдением лишь одной одноканальной области (правая область графика на рис. 1б), а не двух, как на рис. 1а).

Заметим также, что рассмотрение общего случая позволяет понять причины (vi) относительно слабой видности аномальных плато, заключающиеся в наблюдении плато кондактанса одного канала на фоне изменяющегося кондактанса второго канала.

Еще одна особенность (v), заключающаяся в плавном изменении значений аномальных плато кондактанса от кривой к кривой при изменении V_Δ , требует рассмотрения серии затворных характеристик. Этому посвящен следующий подраздел.

4.3. Серия затворных характеристик кондактанса двухканального КТК. Для того, чтобы проследить эволюцию аномальных плато, рассмотрим серию затворных характеристик кондактанса двухканального КТК с разными емкостями $C_g^I \neq C_g^{II}$ при различных значениях разности затворных напряжений V_Δ . Серия расчетных затворных характеристик при $T = 4.2$ К показана на рис. 5. На отдельных кривых (см., например, кривые, показанные жирными линиями на рис. 5) наблюдаются аномальные плато при значениях, не кратных $2e^2/h$. Кроме этого видна эволюция аномальных плато от кривой к кри-

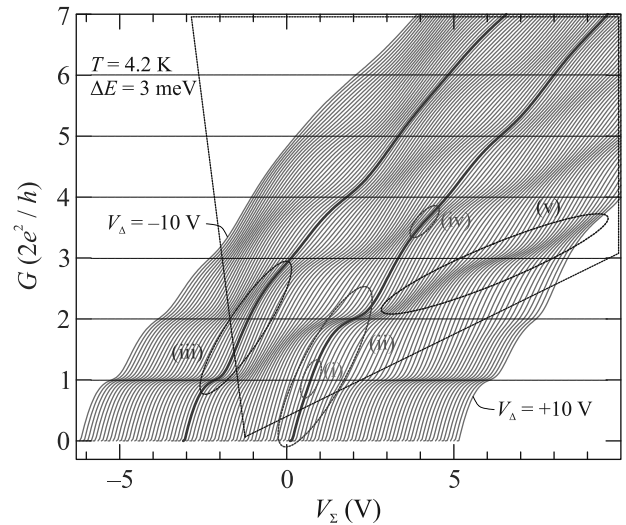


Рис. 5. (Цветной онлайн) Серия расчетных затворных характеристик $G_I(V_\Sigma) + G_{II}(V_\Sigma)$ двухканального КТК при различных значениях разности затворных напряжений V_Δ в диапазоне от -10 до $+10$ В и при значениях параметров $C_g^I = 1.0 \cdot 10^{-3} \cdot C_{\mu 0}$, $C_g^{II} = 3.5 \cdot 10^{-3} \cdot C_{\mu 0}$, $C_{int} = 0.75 \cdot C_{\mu 0}$, $\Delta E = 3$ мэВ и $T = 4.2$ К. Показаны примеры особенностей кондактанса: (i) отсутствие плато при значении, кратном $2e^2/h$, (ii) прыжок кондактанса на $4e^2/h$, (iii) прыжок кондактанса на величину, не кратную $2e^2/h$, (iv) аномальное плато при значении, не кратном $2e^2/h$, (v) эволюция, т.е. плавное изменение значения кондактанса на плато от кривой к кривой. Пунктирными линиями ограничена область наложения двух квантующихся кондактансов параллельных каналов. Вне этой области проводит лишь один из двух каналов

вой, заключающаяся в плавном изменении значений кондактанса на аномальных плато, между двух соседних значений, кратных $2e^2/h$. В целом, отдельная затворная характеристика $G_I(V_\Sigma) + G_{II}(V_\Sigma)$ перестает быть ступенчатой кривой с плато при значениях, кратных $2e^2/h$, предсказываемой одночастичной моделью. Заметим, что результаты расчета, представленные на рис. 5, воспроизводят все (i-vi) существенные экспериментальные особенности, представленные на рис. 1, включая эволюцию аномальных плато при изменении V_Δ .

5. Выводы. Серия экспериментально измеренных затворных характеристик $G(V_\Sigma)$ двух КТК траншейного типа при различных значениях разности затворных напряжений V_Δ демонстрирует ряд выраженных особенностей, таких как отсутствие некоторых плато, прыжки кондактанса на $4e^2/h$ и на величины, не кратные $2e^2/h$, аномальные плато при значениях, не кратных $2e^2/h$, плавное изменение значений аномальных плато и их относительно

слабая видность. Мы показали, что возникновение этих особенностей может быть связано с образованием нескольких параллельных проводящих каналов внутри одиночного КТК. Моделирование суммарного кондактанса двух каналов воспроизводит все перечисленные особенности кондактанса, наблюдающиеся в эксперименте. Мы продемонстрировали, что для случая симметрично расположенных каналов характерны прыжки кондактанса на $4e^2/h$, в то время как для случая асимметричных каналов прыжки могут происходить на величины, не кратные $2e^2/h$. В последнем случае наблюдается серия аномальных плато. Рассмотренная модель может быть легко обобщена на случай нескольких (более двух) каналов, или упрощена до более тривиального случая сложения квантующегося кондактанса и плавно изменяющегося неквантующегося кондактанса параллельного проводника. Мы убеждены, что предложенная модель может оказаться особенно полезной при анализе измерений кондактанса, демонстрирующих особенности, аналогичные описанным выше, поскольку наличие параллельной проводимости не всегда очевидно заранее.

Финансирование работы. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект # 22-12-00343 – экспериментальные измерения и теоретическое моделирование) и Министерства науки и высшего образования РФ (проект # FWGW-2022-0011 – характеристика исходных гетероструктур).

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

1. B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel, and C. T. Foxon, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 848 (1988); <https://doi.org/10.1103/physrevlett.60.848>.
2. D. A. Wharam, T. J. Thornton, R. Newbury, M. Pepper, H. Ahmed, J. E. F. Frost, D. G. Hasko, D. C. Peacock, D. A. Ritchie, and G. A. C. Jones, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **21**, L209 (1988); <https://doi.org/10.1088/0022-3719/21/8/002>.
3. K. J. Thomas, J. T. Nicholls, M. Y. Simmons, M. Pepper, D. R. Mace, and D. A. Ritchie, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 135 (1996); <https://doi.org/10.1103/physrevlett.77.135>.
4. K. J. Thomas, J. T. Nicholls, M. Y. Simmons, M. Pepper, D. R. Mace, and D. A. Ritchie, *Philos. Mag. B* **77**, 1213 (1998); <https://doi.org/10.1080/13642819808205012>.
5. A. Kristensen, H. Bruus, A. E. Hansen, J. B. Jensen, P. E. Lindelof, C. J. Marckmann, J. Nygård, C. B. Sørensen, F. Beuscher, A. Forchel, and M. Michel, *Phys. Rev. B* **62**, 10950 (2000); <https://doi.org/10.1103/physrevb.62.10950>.
6. O. P. Sushkov, *Phys. Rev. B* **64**, 155319 (2001); <https://doi.org/10.1103/physrevb.64.155319>.
7. S. M. Cronenwett, H. J. Lynch, D. Goldhaber-Gordon, L. P. Kouwenhoven, C. M. Marcus, K. Hirose, N. S. Wingreen, and V. Umansky, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 226805 (2002); <https://doi.org/10.1103/physrevlett.88.226805>.
8. K.-F. Berggren and I. I. Yakimenko, *Phys. Rev. B* **66**, 085323 (2002); <https://doi.org/10.1103/physrevb.66.085323>.
9. D. J. Reilly, *Phys. Rev. B* **72**, 033309 (2005); <https://doi.org/10.1103/physrevb.72.033309>.
10. A. P. Micolich, *J. Phys. Condens. Matter* **23**, 443201 (2011); <https://doi.org/10.1088/0953-8984/23/44/443201>.
11. F. Bauer, J. Heyder, E. Schubert, D. Borowsky, D. Taubert, B. Bruognolo, D. Schuh, W. Wegscheider, J. von Delft, and S. Ludwig, *Nature* **501**, 73 (2013); <https://doi.org/10.1038/nature12421>.
12. B. Brun, F. Martins, S. Faniel, B. Hackens, G. Bachelier, A. Cavanna, C. Ulysse, A. Ouerghi, U. Gennser, D. Mailly, S. Huant, V. Bayot, M. Sanquer, and H. Sellier, *Nat. Commun.* **5**, 4290 (2014); <https://doi.org/10.1038/ncomms5290>.
13. I. V. Zozoulenko and S. Ihnatsenka, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 164217 (2008); <https://doi.org/10.1088/0953-8984/20/16/164217>.
14. A. M. Lunde, A. De Martino, A. Schulz, R. Egger, and K. Flensberg, *New J. Phys.* **11**, 023031 (2009); <https://doi.org/10.1088/1367-2630/11/2/023031>.
15. A. V. Chaplik, *JETP Lett.* **31**, 252 (1980).
16. J. S. Meyer and K. A. Matveev, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 023203 (2009); <https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/2/023203>.
17. J. S. Meyer, K. A. Matveev, and A. I. Larkin, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 126404 (2007); <https://doi.org/10.1103/physrevlett.98.126404>.
18. A. C. Mehta, C. J. Umrigar, J. S. Meyer, and H. U. Baranger, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 246802 (2013); <https://doi.org/10.1103/physrevlett.110.246802>.
19. S.-C. Ho, H.-J. Chang, C.-H. Chang, S.-T. Lo, G. Creeth, S. Kumar, I. Farrer, D. Ritchie, J. Griffiths, G. Jones, M. Pepper, and T.-M. Chen, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 106801 (2018); <https://doi.org/10.1103/physrevlett.121.106801>.
20. W. K. Hew, K. J. Thomas, M. Pepper, I. Farrer, D. Anderson, G. A. C. Jones, and D. A. Ritchie, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 056804 (2009); <https://doi.org/10.1103/physrevlett.102.056804>.
21. L. W. Smith, W. K. Hew, K. J. Thomas, M. Pepper, I. Farrer, D. Anderson, G. A. C. Jones, and D. A. Ritchie, *Phys. Rev. B* **80**, 041306 (2009); <https://doi.org/10.1103/physrevb.80.041306>.

22. W.K. Hew, K.J. Thomas, M. Pepper, I. Farrer, D. Anderson, G.A.C. Jones, and D.A. Ritchie, *Physica E* **42**, 1118 (2010); <https://doi.org/10.1016/j.physe.2009.11.009>.
23. L.W. Smith, W.K. Hew, K.J. Thomas, M. Pepper, I. Farrer, D. Anderson, G.A.C. Jones, and D.A. Ritchie, *Physica E* **42**, 1114 (2010); <https://doi.org/10.1016/j.physe.2009.11.001>.
24. S. Kumar, K.J. Thomas, L.W. Smith, M. Pepper, G.L. Creeth, I. Farrer, D. Ritchie, G. Jones, and J. Griffiths, *Phys. Rev. B* **90**, 201304(R) (2014); <https://doi.org/10.1103/physrevb.90.201304>.
25. S. Kumar, M. Pepper, H. Montagu, D. Ritchie, I. Farrer, J. Griffiths, and G. Jones, *Appl. Phys. Lett.* **118**, 124002 (2021); <https://doi.org/10.1063/5.0045702>.
26. N.K. Patel, J.T. Nicholls, L. Martin-Moreno, M. Pepper, J.E.F. Frost, D.A. Ritchie, and G.A.C. Jones, *Phys. Rev. B* **44**, 13549 (1991); <https://doi.org/10.1103/physrevb.44.13549>.
27. T.-M. Chen, A.C. Graham, M. Pepper, I. Farrer, and D.A. Ritchie, *Appl. Phys. Lett.* **93**, 032102 (2008); <https://doi.org/10.1063/1.2963478>.
28. K.-F. Berggren and M. Pepper, *Phil. Trans. R. Soc. A* **368**, 1141 (2010); <https://doi.org/10.1098/rsta.2009.0226>.
29. P. Debray, S.M.S. Rahman, J. Wan, R.S. Newrock, M. Cahay, A.T. Ngo, S.E. Ulloa, S.T. Herbert, M. Muhammad, and M. Johnson, *Nat. Nanotechnol.* **4**, 759 (2009); <https://doi.org/10.1038/nnano.2009.240>.
30. D.A. Pokhabov, A.G. Pogosov, E.Yu. Zhdanov, A.A. Shevyrin, A.K. Bakarov, and A.A. Shklyayev, *Appl. Phys. Lett.* **112**, 082102 (2018); <https://doi.org/10.1063/1.5019906>.
31. D.A. Pokhabov, A.G. Pogosov, E.Yu. Zhdanov, A.K. Bakarov, and A.A. Shklyayev, *Appl. Phys. Lett.* **115**, 152101 (2019); <https://doi.org/10.1063/1.5123035>.
32. D.A. Pokhabov, A.G. Pogosov, E.Yu. Zhdanov, A.K. Bakarov, and A.A. Shklyayev, *Appl. Phys. Lett.* **118**, 012104 (2021); <https://doi.org/10.1063/5.0038492>.
33. T. Masuda, K. Sekine, K. Nagase, K.S. Wickramasinghe, T.D. Mishima, M.B. Santos, and Y. Hirayama, *Appl. Phys. Lett.* **112**, 192103 (2018); <https://doi.org/10.1063/1.5023836>.
34. D.A. Pokhabov, A.G. Pogosov, E.Yu. Zhdanov, and A.K. Bakarov, *JETP Lett.* **117**, 299 (2023); <https://doi.org/10.1134/s0021364022603049>.
35. D.I. Sarypov, D.A. Pokhabov, A.G. Pogosov, E.Yu. Zhdanov, and A.K. Bakarov, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics* **16**, 117 (2023); <https://doi.org/10.18721/jpm.161.320>.
36. D.I. Sarypov, D.A. Pokhabov, A.G. Pogosov, E.Yu. Zhdanov, and A.K. Bakarov, *JETP Lett.* **116**(6), 360 (2022); <https://doi.org/10.1134/s0021364022601610>.
37. D.A. Pokhabov, A.G. Pogosov, E.Yu. Zhdanov, A.K. Bakarov, and A.A. Shklyayev, *Semiconductors* **54**, 1605 (2020); <https://doi.org/10.1134/s1063782620120301>.
38. E.T. Owen and C.H.W. Barnes, *Phys. Rev. Appl.* **6**, 054007 (2016); <https://doi.org/10.1103/physrevapplied.6.054007>.
39. I.I. Yakimenko and I.P. Yakimenko, *J. Phys.: Condens. Matter* **34**, 105302 (2022); <https://doi.org/10.1088/1361-648x/ac3f01>.
40. K.-J. Friedland, R. Hey, H. Kostial, R. Klann, and K. Ploog, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4616 (1996); <https://doi.org/10.1103/physrevlett.77.4616>.
41. A.G. Pogosov, M.V. Budantsev, E.Yu. Zhdanov, D.A. Pokhabov, A.K. Bakarov, and A.I. Toropov, *Appl. Phys. Lett.* **100**, 181902 (2012); <https://doi.org/10.1063/1.4709485>.
42. A.G. Pogosov, A.A. Shevyrin, D.A. Pokhabov, E.Yu. Zhdanov, and S. Kumar, *J. Phys: Condens. Matter* **34**, 263001 (2022); <https://doi.org/10.1088/1361-648x/ac6308>.
43. E.Yu. Zhdanov, A.G. Pogosov, M.V. Budantsev, D.A. Pokhabov, and A.K. Bakarov, *Semiconductors* **51**, 8 (2017); <https://doi.org/10.1134/S1063782617010250>.
44. L.I. Glazman, G.B. Lesovik, D.E. Khmel'nitskii, and R.I. Shekhter, *JETP Lett.* **48**, 238 (1988).
45. M. Büttiker, *Phys. Rev. B* **41**, 7906(R) (1990); <https://doi.org/10.1103/physrevb.41.7906>.
46. A. Kristensen, J. Bo Jensen, M. Zaffalon, C.B. Sørensen, S.M. Reimann, P.E. Lindelof, M. Michel, and A. Forchel, *J. Appl. Phys.* **83**, 607 (1997); <https://doi.org/10.1063/1.366724>.
47. A. Kristensen, C.B. Sørensen, P.E. Lindelof, J. Bo Jensen, J. Nygård, M. Zaffalon, F. Beuscher, M. Michel, and A. Forchel, *Solid-State Electronics* **42**, 1103 (1998); [https://doi.org/10.1016/S0038-1101\(97\)00310-9](https://doi.org/10.1016/S0038-1101(97)00310-9).
48. N.K. Patel, L. Martin-Moreno, M. Pepper, R. Newbury, J.E.F. Frost, D.A. Ritchie, G.A.C. Jones, J.T.M.B. Janssen, J. Singleton, and J.A.A.J. Perenboom, *J. Phys.: Condens. Matter* **2**, 7247 (1990); <https://doi.org/10.1088/0953-8984/2/34/018>.
49. C. Rössler, S. Baer, E. de Wiljes, P.-L. Ardelt, T. Ihn, K. Ensslin, C. Reichl, W. Wegscheider, *New J. Phys.* **13**, 113006 (2011); <https://doi.org/10.1088/1367-2630/13/11/113006>.
50. B. Brun, F. Martins, S. Faniel, B. Hackens, A. Cavanna, C. Ulysse, A. Ouerghi, U. Gennser, D. Mailly, P. Simon, S. Huan, V. Bayot, M. Sanquer, and H. Sellier, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 136801 (2016); <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.116.136801>.

Конфигурация “барьер–яма” в схеме квантового гироскопа на основе геометрической фазы атомарного конденсата

⁺В. А. Томили¹⁾, А. М. Ростом^{+,*}, Л. В. Ильичев^{+,×}

⁺Институт автоматики и электрометрии Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия

^{*}Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия

[×]Институт лазерной физики Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 23 января 2024 г.

После переработки 7 февраля 2024 г.

Принята к публикации 7 февраля 2024 г.

Получила развитие перспективная схема квантового гироскопа на основе измерения специфической геометрической фазы в атомарном конденсате Бозе–Эйнштейна. Чувствительными к вращению элементами служат две кольцевые конфигурации конденсата. Их однородность нарушена парами локализованных потенциалов – барьером и ямой. Порядок расположения этих потенциалов в каждом из колец задает их противоположные ориентации относительно вектора угловой скорости вращения системы отсчета устройства. Надлежащее варьирование параметров пар “барьер–яма” порождает при наличии вращения противоположные геометрические фазы в кольцевых модах единого конденсата. Разность геометрических фаз можно обнаружить в интерференционном эксперименте. Приведены результаты расчета разностей геометрических фаз для конфигураций мод конденсата атомов ^{87}Rb в виде колец диаметром 0.5 см и для угловых скоростей, сравнимых со скоростью вращения Земли вокруг своей оси.

DOI: 10.31857/S1234567824050094, EDN: GSUAЕК

Введение. Современные экспериментальные методы приготовления и контроля ансамблей ультрахолодных атомов находят применения в создании высокочувствительных инерциальных датчиков [1–3]. Весьма актуальными становятся перспективы исследования альтернатив оптических устройств с заменой их устройствами на волнах материи, в которых вместо интерференции оптических волн используется интерференция когерентных многочастичных состояний. Типичным (с точки зрения теории) примером таких состояний является конденсат Бозе–Эйнштейна (Bose–Einstein condensate, BEC). Классические оптические гироскопы основаны на эффекте Саньяка. Регистрируемая в них саньяковская фаза дается выражением [4, 5]

$$\phi_{\text{Sagnac}} = \frac{4\omega}{c^2} \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{S}. \quad (1)$$

Здесь $\mathbf{\Omega}$ – угловая скорость вращения системы отсчета, $\mathbf{S}$ – ориентированная площадь интерферометра, ω – частота излучения. В атомном интерферометре вместо ω следует использовать $mc^2/\hbar$, где m – масса атома. Это значительно бóльшая величина, что и обеспечивает потенциальное преимущество

устройств на волнах материи над оптическими гироскопами. Однако, буквальное воспроизведение схемы саньяковского интерферометра с использованием атомарных бозе-конденсатов является нетривиальной задачей. Различные предложения по реализации подобных схем включают в себя использование распространения волн материи в аналогах волноводов [6–8], а также приготовление специфических квантовых состояний конденсата [9].

В работе [10] был предложен альтернативный подход к построению гироскопической схемы на основе BEC. Вместо фазы Саньяка предлагалось измерять специфическую геометрическую фазу, порожденную вращением системы отсчета конденсата. Основную идею такого гироскопа можно представить следующим образом, отвлекаясь пока от деталей процесса генерации геометрической фазы. Предполагается, что конденсат образован двумя пространственно-разнесенными модами 1 и 2, полученными в результате когерентного разделения изначального единого конденсата. Конфигурации обеих мод должны обеспечивать чувствительность состояния конденсата к вращению его системы отсчета. Ориентации конфигураций мод относительно вектора угловой скорости $\mathbf{\Omega}$ таковы, что вращение в разной степени сказывается на состояниях мод. Во всех

¹⁾e-mail: 8342tomilin@mail.ru

остальных отношениях моды 1 и 2 эквивалентны. Предполагается, что одинаковым образом организованы и процессы генерации геометрических фаз в модах²⁾. Однако, различная восприимчивость мод к вращению приводит к различию возникающих геометрических фаз: $\theta_1 \neq \theta_2$. Состояние конденсата претерпевает изменение:

$$\sum_{n=0}^N f_n |n\rangle_1 \otimes |N-n\rangle_2 \rightarrow \sum_{n=0}^N f_n e^{in\theta_1} |n\rangle_1 \otimes e^{i(N-n)\theta_2} |N-n\rangle_2. \quad (2)$$

Здесь N – полное число частиц в конденсате (для простоты будем полагать его фиксированным), а f_n – амплитуды вероятности распределений атомов по модам. Физически значимым является изменение относительных фаз этих амплитуд:

$$f_n \rightarrow f_n e^{in(\theta_1 - \theta_2)}, \quad (3)$$

что модифицирует картину последующей интерференции атомов из мод 1 и 2, откуда можно извлечь информацию о скорости вращения Ω .

В [10] рассматривались конфигурации мод в виде колец, каждое из которых содержит на некотором своем участке дополнительный потенциал – так называемый “дефект”, или “дефектный потенциал”, (рис. 1). В отсутствие дефектов конфигурации обе-

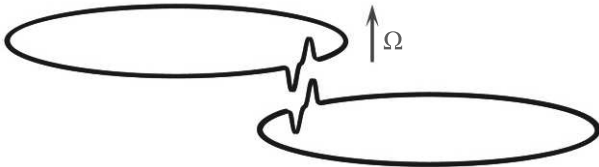


Рис. 1. (Цветной онлайн) Принципиальная схема основной части гироскопа. Плоскости обоих кольцевых конфигураций конденсата нормальны к вектору угловой скорости Ω вращения системы отсчета гироскопа. Символически показанные дополнительные потенциалы барьера и ямы задают различную ориентацию колец по отношению к этому вектору

их мод одинаковы. Принципиально важно, что формы этих дефектов задают ориентации (выделенные направления обхода) колец (отметим, что приведенное на рис. 1 взаимное пространственное расположение колец выбрано так, чтобы можно было создать

²⁾Имеются ввиду геометрические фазы волновых функций одночастичных состояний мод. Для простоты исключаем взаимодействие между атомами конденсата.

дополнительные потенциалы с помощью всего двух пучков излучения, распространяющихся нормально плоскостям колец: один создает ямы в обеих модах, а второй барьеры, также в обеих модах). Геометрическая фаза генерируется варьированием параметров дополнительных потенциалов. В предложенной в [10] схеме плоскости колец нормальны Ω , а их ориентации относительно этого вектора противоположны друг другу. Это оптимальные условия для регистрации вращения: $\theta_1 = -\theta_2$, и разность $\theta_1 - \theta_2$ обращается в нуль при $\Omega = 0$.

Предложенный в [10] подход был основан на описании дефектов в терминах трансфер-матриц. При этом мы ограничились использованием основного общего свойства трансфер-матриц – их принадлежность группе $SU(1, 1)$. Две ориентации колец задавались произведениями пары типовых матриц из $SU(1, 1)$ в прямом и обратном порядках. Такой подход позволил обойтись без привязки к конкретной структуре дефектных потенциалов, что существенно упростило рассмотрение, но привнесло в него элемент искусственности. В частности, полностью игнорировалась возможная зависимость элементов трансфер-матрицы от энергии атомов.

Целью настоящей работы является построение гироскопической схемы, где место абстрактной модельной трансфер-матрицы займет результат ее строгого вывода из формы дефектного потенциала, который должен обеспечить ориентируемость кольца. Очевидный простейший вариант такого потенциала есть комбинация “барьер-яма”. В следующем разделе построена модель схемы с таким потенциалом. В третьем разделе приведены и обсуждены результаты численных расчетов возможностей схемы с прицелом на регистрацию вращения Земли вокруг своей оси.

Модель. Используется простейшая модель конденсата невзаимодействующих атомов. По этой причине можно оперировать одночастичной волновой функцией при расчете геометрической фазы. Таким образом, волновые функции, характеризующие пространственные конфигурации мод, фактически не зависят от чисел атомов в них. Тем не менее, полное число атомов в конденсате будет иметь значение при наблюдении интерференции между модами (мы вернемся к этому вопросу в заключительной части работы).

Пусть система отсчета, в которой будут рассматриваться кольцевые моды конденсата, вращается с угловой скоростью Ω , ориентированной нормально плоскости колец. Уравнение для стационарной волновой функции атома на кольце получается из

обычного уравнения Шредингера введением дополнительного члена, связанного с вращением [11]:

$$\begin{aligned} \Psi''(\varphi) - 2i\xi\Psi'(\varphi) + \varepsilon\Psi(\varphi) = \\ = a_+\delta(\varphi - \varphi_0)\Psi(\varphi_0) + a_-\delta(\varphi + \varphi_0)\Psi(-\varphi_0). \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь $\varepsilon = mR^2E/\hbar^2$ – безразмерная энергия (m – масса атома, R – радиус кольца), $\xi = mR^2\Omega/\hbar$ – безразмерный параметр, характеризующий скорость вращения системы отсчета (отметим, что он с точностью до множителя 4π равен саньяковской фазе, определенной в (1)), а штрихами обозначены производные по угловой координате на кольце. Приведем характерные масштабы величин, входящих в задачу. Для конденсата, состоящего из атомов ^{87}Rb , радиуса кольца $R = 0.25$ см (что является принципиально достижимым для экспериментальных технологий в ближайшей перспективе), а также скорости Ω , отвечающей вращению Земли вокруг своей оси, параметр ξ оказывается равным 0.392. Отметим, что для атомов других щелочных элементов и их изотопов, в которых продемонстрировано явление бозеконденсации (таких, как ^7Li [12], ^{23}Na [13], ^{39}K [14], ^{40}Ca [15], ^{133}Cs [16] и др.), величина ξ будет иметь такой же порядок. Поэтому разумно подбирать другие параметры задачи с прицелом на регистрацию $\xi \simeq 0.1 \div 1$.

В правой части (4) стоят слагаемые, отвечающие дефекту – паре сингулярных потенциалов в точках $\pm\varphi_0$; $a_{\pm}$ – характерные величины этих потенциалов³⁾. При $a_+ \neq a_-$ пара сингулярных потенциалов задает, очевидно, различие двух направлений обхода кольца (на рис. 1 ориентации пространственных обозначены противонаправленными стрелками). Волновая функция непрерывна, а ее производная терпит разрывы в точках $\pm\varphi_0$ [20]:

$$\begin{aligned} \Psi(\pm\varphi_0 - 0) &= \Psi(\pm\varphi_0 + 0), \\ \Psi'(\pm\varphi_0 + 0) - \Psi'(\pm\varphi_0 - 0) &= a_{\pm}\Psi(\pm\varphi_0). \end{aligned} \quad (5)$$

Вне сингулярных потенциалов движение атома свободно и может быть представлено суперпозицией фундаментальных решений:

$$\begin{aligned} \Psi(\varphi) &= f_+ \exp(i\kappa_+\varphi) + f_- \exp(i\kappa_-\varphi); \\ &\quad -\varphi_0 < \varphi < \varphi_0, \\ \Psi(\varphi) &= g_+ \exp(i\kappa_+\varphi) + g_- \exp(i\kappa_-\varphi); \\ &\quad \varphi_0 < \varphi < 2\pi - \varphi_0, \\ \kappa_{\pm} &= \xi \pm \sqrt{\xi^2 + \varepsilon}. \end{aligned} \quad (6)$$

³⁾ Отметим, что приготовление начального состояния конденсата осуществляется сразу во вращающейся системе отсчета. Возможность приготовления конденсата в кольцевых конфигурациях с подвижными (вращающимися) потенциальными дефектами была продемонстрирована в [17–19].

Связь между амплитудами $f_{\pm}$ и $g_{\pm}$ в точках $\pm\varphi_0$ дается соотношениями, следующими из (5) и геометрии кольца:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} f_+ \\ f_- \end{pmatrix} &= \frac{i}{\kappa} \times \\ &\times \begin{pmatrix} -a_- - i\kappa & -a_- \exp(i\kappa\varphi_0) \\ a_- \exp(-i\kappa\varphi_0) & a_- - i\kappa \end{pmatrix} \times \\ &\times \begin{pmatrix} g_+ \exp(2\pi i\kappa_+) \\ g_- \exp(2\pi i\kappa_-) \end{pmatrix}; \quad \varphi = \varphi_0, \\ \begin{pmatrix} g_+ \\ g_- \end{pmatrix} &= \frac{i}{\kappa} \times \\ &\times \begin{pmatrix} -a_+ - i\kappa & -a_+ \exp(-i\kappa\varphi_0) \\ a_+ \exp(i\kappa\varphi_0) & a_+ - i\kappa \end{pmatrix} \times \\ &\times \begin{pmatrix} f_+ \\ f_- \end{pmatrix}; \quad \varphi = -\varphi_0, \\ \kappa &= \kappa_+ - \kappa_- = 2\sqrt{\xi^2 + \varepsilon}. \end{aligned} \quad (7)$$

Это позволяет установить систему уравнений непосредственно на $g_{\pm}$:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} g_+ \\ g_- \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} u & v \\ \bar{v} & \bar{u} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_+ \exp(2\pi i\kappa_+) \\ g_- \exp(2\pi i\kappa_-) \end{pmatrix} \equiv \\ &\equiv \mathcal{M} \begin{pmatrix} g_+ \exp(2\pi i\kappa_+) \\ g_- \exp(2\pi i\kappa_-) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (8)$$

Трансфер-матрица $\mathcal{M}$ оказывается принадлежащей группе $SU(1, 1)$, т.е. $|u|^2 - |v|^2 = 1$; черта над символом означает комплексное сопряжение. Таким образом, она обладает главным свойством, отмеченным во Введении.

Будем далее рассматривать случай

$$a_+ = -a_- = a, \quad (9)$$

т.е. полагать, что высота барьера и глубина ямы одинаковы. Элементы трансфер-матрицы тогда принимают вид⁴⁾:

$$\begin{aligned} u &= 1 + \frac{a^2}{\kappa^2} \cdot (1 - \exp(-2i\kappa\varphi_0)), \\ v &= \frac{2ia}{\kappa^2} \cdot (a + i\kappa) \cdot \sin(\kappa\varphi_0). \end{aligned} \quad (10)$$

Как видно, элементы трансфер-матрицы получают явную зависимость от энергии атома – этот эффект невозможно было бы учесть при задании абстрактной трансфер-матрицы, не привязанной к конкретному виду потенциала.

⁴⁾ При $a \neq 0$ на кольце определена ориентация.

Система (8) совместна при условии

$$\cos(2\pi\xi) = \left(1 + \frac{a^2}{\kappa^2}\right) \cdot \cos(\pi\kappa) - \frac{a^2}{\kappa^2} \cdot \cos(\kappa(\pi - 2\varphi_0)), \quad (11)$$

которое можно рассматривать как уравнение на κ . Амплитуды $g_{\pm}$ также оказываются связанными:

$$\frac{g_+}{g_-} = \frac{v \cdot \exp(2\pi i \kappa_-)}{1 - u \cdot \exp(2\pi i \kappa_+)}. \quad (12)$$

Если параметры потенциала (глубина ямы и высота барьера) меняются, пространственная мода конденсата приобретает фазу $\theta_{\text{total}} = \theta_{\text{dyn}} + \theta_{\text{geom}}$, состоящую из двух частей – динамической θ_{dyn} и геометрической θ_{geom} . В качестве параметризации изменения потенциала будем рассматривать следующий закон⁵⁾:

$$a = a_0 \cdot \cos^2 \alpha; \quad \alpha \in [\alpha_1, \alpha_2]. \quad (13)$$

С каждым выбранным интервалом вариации α связана определенная геометрическая фаза:

$$\theta_{\text{geom}} = \arg\langle\Psi(\alpha_1)|\Psi(\alpha_2)\rangle + \frac{i}{2} \int_{\alpha_1}^{\alpha_2} \frac{\langle\Psi|\dot{\Psi}\rangle - \langle\dot{\Psi}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} d\alpha. \quad (14)$$

Здесь θ_{geom} представлена как разница θ_{total} (первый член в правой части) и θ_{dyn} . Точка над символом означает дифференцирование по α . Данное выражение записано в форме, делающей его инвариантным не только относительно любого калибровочного преобразования

$$\Psi(\alpha) \rightarrow \exp[i\phi(\alpha)]\Psi(\alpha), \quad (15)$$

но и относительно преобразований, в которых вместо экспоненты фигурирует произвольная гладкая ненулевая функция $F(\alpha)$. Последнее обстоятельство удобно при проведении вычислений, т.к. нет необходимости следить за нормировкой волновой функции. Отмеченная инвариантность геометрической фазы делает ее истинно физической экспериментально измеримой величиной в отличие от θ_{total} и θ_{dyn} [21]. В частности, подходящим выбором $\phi(\alpha)$ в (15) можно устранить динамическую фазу (второе слагаемое в (14)), что сведет θ_{geom} к θ_{total} .

Как отмечено во Введении, физической наблюдаемой, содержащей информацию об угловой скорости вращения, является разница фаз, приобретаемых различными пространственными модами конденсата. Последние, в свою очередь, отличаются ориентацией относительно вектора угловой скорости вращения Ω . Простейшим вариантом изменения ориентации является перестановка положений барьера и

ямы, что в рассматриваемом нами случае симметричного дефекта (9) сводится к изменению знака a_0 в (13). При этом значение параметра κ , определенного в (7) (а следовательно, и энергии ε), не меняется, поскольку, как следует из уравнения (13), κ зависит лишь от абсолютной величины потенциала. Волновая функция, однако, оказывается чувствительной к такой замене, поскольку амплитуды $f_{\pm}, g_{\pm}$ зависят от первой степени a (см. (10), (12)). Таким образом, представляет интерес вычисление величины

$$\Delta\theta_{\text{geom}} = \theta_{\text{geom}} \Big|_{a_0} - \theta_{\text{geom}} \Big|_{-a_0}. \quad (16)$$

Эта величина определяет сдвиг интерференционной картины в реальном эксперименте с модами конденсата. Необходимые соотношения для ее вычисления приведены в Приложении.

Результаты и обсуждение. В [10] была предложена схема компенсации вклада от динамической фазы путем выбора подходящего замкнутого пути в пространстве параметров потенциала, по которому производится вариация. При выбранной форме вариации потенциала (13) таковым была бы циклическая вариация по пути $[\alpha_1, \alpha_2] = [0, \pi]$. Однако, вычисления по формулам (14), (16) показывают, что при этом фаза θ_{geom} тождественно обращается в нуль⁶⁾. Поэтому был выбран вдвое меньший интервал $[\alpha_1, \alpha_2] = [0, \pi/2]$. Таким образом, в конечной точке эволюции состояния обеих мод конденсата становятся совершенно одинаковыми (поскольку оба кольца теряют ориентацию), однако разность фаз между ними будет нетривиальной.

На рисунке 2 приведены зависимости разности геометрических фаз между модами конденсата $\Delta\theta_{\text{geom}}$ из (16) от параметра ξ , характеризующего угловую скорость вращения, при различных расположениях потенциальных дефектов на кольце. Следует отметить несколько обстоятельств. Во-первых, значения разницы геометрических фаз оказались слабо зависящими от величины a_0 дефектных потенциалов. Во-вторых, существенное влияние на указанную разницу имеет взаимное расположение барьера и ямы, т.е. угол φ_0 . Наибольший интерес представляют его малые значения, как видно из рис. 2. Это следует из простых физических соображений – чем ближе расположены барьер и яма, тем более четко определена ориентация колец.

⁵⁾Поскольку дефект описывается только одним параметром, конкретный способ его вариации не имеет принципиального значения.

⁶⁾Различные формы вариации приводят к аналогичному результату, т.е. при любой циклической вариации потенциала геометрическая фаза обращается в нуль. Это обстоятельство является следствием одномерности пространства параметров, от которых зависит потенциал.

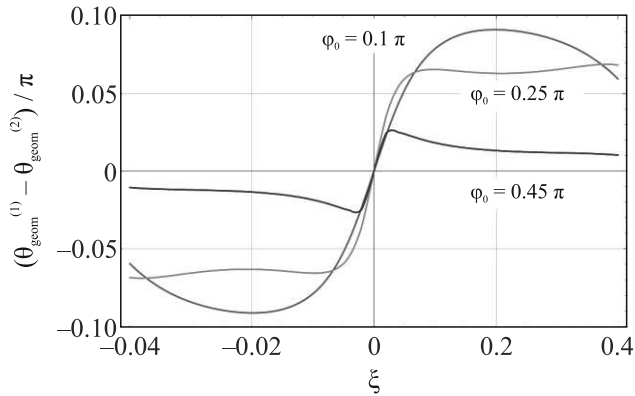


Рис. 2. (Цветной онлайн) Разница геометрических фаз пространственных мод при вариации потенциала вида $a = a_0 \cdot \cos^2 \alpha$, $\alpha \in [0, \pi/2]$, $a_0 = 2$ как функции безразмерной угловой скорости ξ вращения системы отсчета при различных расположениях барьера и ямы на кольце

При $\varphi_0 = \pi/2$ ориентация исчезает, а вместе с ней и разность геометрических фаз. Близкие к нулю значения φ_0 обеспечивают как наибольшую величину регистрируемой разницы фаз, так и наибольший наклон кривой зависимости от угловой скорости при $\xi \sim 0.4$. Последнее обстоятельство позволяет проводить более точные измерения угловых скоростей порядка скорости вращений Земли вокруг своей оси ($\xi = 0.392$). С другой стороны, величина углового раствора между барьером и ямой довольно слабо влияет, как видно из рис. 2, на наклон кривых и, следовательно, на точность измерения при малых значениях $\xi \sim 0.4$.

Общий вид данной зависимости качественно схож с результатами [10], что позволяет сделать вывод о корректности “абстрактной” модели на основе трансфер-матриц.

В отсутствие информации о порядке величины регистрируемой угловой скорости желательно иметь как можно более широкий диапазон, позволяющий однозначно сопоставить измеренное значение разницы фаз с угловой скоростью. Этот диапазон может быть расширен с увеличением радиуса колец.

Заключение. В работе развита модель квантового гироскопа, основанного на геометрической фазе атомарного бозе-конденсата. Измеряемой величиной, содержащей информацией о скорости вращения, является относительная фаза двух кольцевых пространственных мод единого конденсата. Чувствительность к вращению системы отсчета устройства достигается путем введения в каждую из мод дополнительных локализованных конфигураций потенциала – “дефектов”. В результате варьирования

параметров “дефектов” каждая из мод приобретает свой фазовый сдвиг. Их разница может быть зарегистрирована в виде сдвига картины интерференции атомов из обеих мод относительно картины интерференции в отсутствие процесса генерации геометрических фаз. Точность измерения сдвига картины интерференции будет возрастать с увеличением числа атомов, принявших участие в построении интерференционной картины. В этом смысле полное число N атомов в конденсате оказывается важным. Для проведения эксперимента по измерению разницы фаз между модами необходимо реализовать соответствующий атомный интерферометр. Описание его детального устройства выходит за рамки настоящей работы, однако можно с известной осторожностью предположить, что в его основе должны лежать принципы, общие для большинства схем интерферометрии на волнах материи – а именно, организация перекрытия изначально разнесенных пространственных мод [22, 23].

В качестве модели дефекта использовалась комбинация δ -образных барьера и ямы. Их относительное расположение на кольце задает ориентацию и тем самым обеспечивает различную восприимчивость мод к вращению. Хотя это один из простейших вариантов потенциального дефекта, он вполне может быть применим к реальной ситуации. В частности, в [24] была показана эквивалентность задачи с одиночным δ -образным потенциалом на кольце задаче с прямоугольным потенциалом с фиксированным соотношением между шириной и высотой.

В отличие от абстрактной модели описания дефекта кольцевой структуры с помощью некоторой трансфер-матрицы, в реалистичной модели “барьер–яма”, оказываются необходимы незамкнутые траектории варьирования параметров потенциалов. Данное обстоятельство связано со специфическим “симметричным” способом вариации потенциального дефекта – высота ямы в любой момент оказывается равной глубине барьера. Варьируется единственный параметр. Представляется, что в пространстве двух параметров (высота барьера – глубина ямы) можно организовать замкнутую траекторию обхода с ненулевой разницей геометрических фаз мод конденсата. Несомненно важен учет взаимодействия атомов. Это можно попробовать сделать в рамках известной модели Гинзбурга–Гросса–Питаевского или в одномерной модели бозонов с точечным взаимодействием.

Проведенные вычисления позволяют утверждать, что предлагаемая модель обладает необходимыми свойствами гироскопа, т.е. позволяет по значению измеренных фазовых сдвигов однозначно

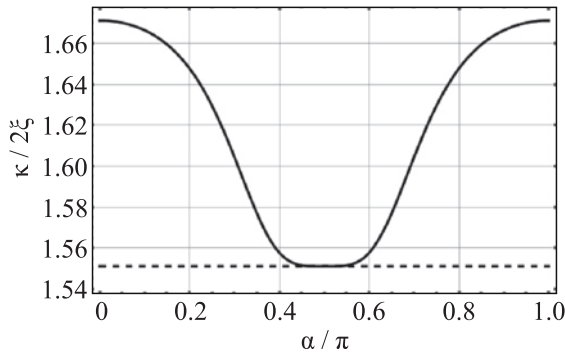


Рис. 1А. Зависимость κ от параметра α из (13) в основном состоянии кольцевой моды при $\xi = 0.392$, $a_0 = 2$

(в определенном диапазоне) определять угловую скорость вращения системы отсчета. Измерения должны производиться в импульсном режиме, поскольку наблюдение интерференции между модами неизбежно приводит к разрушения конденсата. При этом измеряемые фазовые сдвиги оказываются сравнимыми по величине с саньяковской фазой, наблюдаемой в традиционных гироскопических схемах с использованием атомных интерферометров.

Финансирование работы. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда # 23-12-00182 (<https://rscf.ru/project/23-12-00182/>).

Конфликт интересов. Авторы не имеют конфликтов интересов.

Приложение

При варьировании потенциала неявно подразумевается, что уравнение (11) имеет решение при всех значениях a . Этому условию удовлетворяют не все ветви решений (11). Их можно пронумеровать, заметив, что при $a = 0$

$$\kappa_n \Big|_{a=0} = \pm 2\xi + 2n, \quad (\text{A.1})$$

где n – целое число. При расчетах использовалось решение с $n = 1$, поскольку именно оно соответствует основному состоянию конденсата. Оно проиллюстрировано на рис. 1А.

Выражение (14) для геометрической фазы не зависит от нормировки волновой функции $|\Psi\rangle$. Поэтому без ограничения общности можно полагать

$$\begin{aligned} g_+ &= v \cdot \exp(2\pi i \kappa_-) \\ g_- &= 1 - u \cdot \exp(2\pi i \kappa_+). \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Вычисление скалярных произведений осуществляется по формуле

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = \int_0^{2\pi} \bar{\Psi}(\varphi) \Phi(\varphi) d\varphi. \quad (\text{A.3})$$

1. K. Bongs, M. Holynski, J. Vovrosh, P. Bouyer, G. Condon, E. Rasel, C. Schubert, W.P. Schleich, and A. Roua, *Nat. Rev. Phys.* **1**, 731 (2019).
2. B. Barrett, R. Geiger, I. Dutta, M. Meunier, B. Canuel, A. Gauguet, P. Bouyer, and A. Landragin, *Comptes Rendus Physique* **15**, 875 (2014).
3. D.S. Durfee, Y.K. Shaham, and M. A. Kasevich, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 240801 (2006).
4. Г.Б. Малыкин, *УФН* **170**, 1325 (2000) [G. B. Malykin, *Phys.-Uspekhi* **43**, 1229 (2000)].
5. P. Storey and C. Cohen-Tannoudji, *J. Phys. II (France)* **4**, 1999 (1994).
6. T. Muller, X. Wu, A. Mohan, A. Eyvazov, Y. Wu, and R. Dumke, *New J. Phys.* **10**, 073006 (2008).
7. C. L. G. Alzar, *AVS Quantum Science* **1**, 014702 (2019).
8. K. A. Krzyzanowska, J. Ferreras, C. Ryu, E. C. Samson, and M. G. Boshier, *Phys. Rev. A* **108**, 043305 (2023).
9. L. Shao, W. Li, and X. Wang, *arXiv:2006.05794v1[quant-ph]* (2020).
10. А.М. Ростом, В.А. Томили́н, Л.В. Ильичев, *ЖЭТФ* **162**, 307 (2022) [A.M. Rostom, V.A. Tomilin, and L. V. Il'ichov, *JETP* **135**, 264 (2022)].
11. A. J. Leggett, *Quantum Liquids: Bose-Einstein Condensation and Cooper Pairing in Condensed-Matter Systems*, Oxford, Oxford University Press (2006).
12. C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett, and R. G. Hulet, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1687 (1995).
13. K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969 (1995).
14. M. Landini, S. Roy, G. Roati, A. Simoni, M. Inguscio, G. Modugno, and M. Fattori, *Phys. Rev. A* **86**, 033421 (2012).
15. S. Kraft, F. Vogt, O. Appel, F. Riehle, and U. Sterr, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 130401 (2009).
16. T. Weber, J. Herbig, M. Mark, H. Nagerl, and R. Grimm, *Science* **299**, 232 (2003).
17. A. Ramanathan, K. C. Wright, S. R. Muniz, M. Zelan, W. T. Hill, III, C. J. Lobb, K. Helmerson, W. D. Phillips, and G. K. Campbell, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 130401 (2011).
18. K. C. Wright, R. B. Blakestad, C. J. Lobb, W. D. Phillips, and G. K. Campbell, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 025302 (2013).
19. C. Ryu, P. W. Blackburn, A. A. Blinova, and M. G. Boshier, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 205301 (2013).

20. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика (нерелятивистская теория)*, Физматлит, М. (2004).
[L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Course of Theoretical Physics, Vol. 3: Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*, Pergamon, N.Y. (1977)].
21. N. Mukunda, Ann. Phys. **228**, 205 (1993).
22. M. R. Andrews, C. G. Townsend, H.-J. Miesner, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, Science **275**, 637 (1997).
23. Y. Shin, M. Saba, T. A. Pasquini, W. Ketterle, D. E. Pritchard, and A. E. Leanhardt, Phys. Rev. Lett. **92**, 050405 (2004).
24. В. А. Томилин, Л. В. Ильичев, Письма в ЖЭТФ **113**, 212 (2021).

Scattering of linear waves on a soliton¹⁾

A. S. Dmitriev^{+ 2)}, E. A. Dmitrieva^{*+}, A. G. Panin⁺

⁺*Institute for Nuclear Research of the Russian Academy of Sciences, 117312 Moscow, Russia*

^{*}*Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University, 119991 Moscow, Russia*

Submitted 27 December 2023

Resubmitted 5 February 2024

Accepted 6 February 2024

DOI: 10.31857/S1234567824050100, EDN: GWRTEW

Introduction. Solitons are stable bound states which exist on a classical as well as quantum mechanical levels in nonlinear field theories. They have a finite stable shape in space, which preserves over time and during free propagation. The dispersion in the solitons is balanced by focusing nonlinear effects. Solitons are studied in many branches of physics such as optics [1], plasma physics [2], condensed matter physics [3], cosmology [4] and other natural sciences.

In this paper, we consider the scattering of linear high-frequency waves on non-topological solitons in the model of a nonlinear non-integrable Schrödinger equation. We show that, in contrast to the integrable case in which the incoming wave causes a shift in the soliton's position [5], the presence of non-integrable nonlinear interaction leads to a non-trivial scattering picture. Nonlinear interactions give rise to waves of double, triple, and so on, frequencies, while the soliton grows by absorbing particles from the incoming wave. We propose an analytical method for describing the scattering pattern of high-frequency waves on a soliton. To validate the method, we compare its predictions with the results of numerical simulations and observe a strong agreement.

Setup. We start by considering the nonlinear Schrödinger equation in dimensionless variables

$$i\partial_t\psi = -\frac{1}{2}\partial_x^2\psi + V(|\psi|^2)\psi, \quad (1)$$

where the last term introduces nonlinearity. For numerical simulation, we have chosen the potential

$$V(|\psi|^2) = -\lambda|\psi|^2 + g|\psi|^4. \quad (2)$$

Evolution governed by Eq. (1) conserves a number of quantities: the particle number (norm) N ,

$$N = \int dx |\psi|^2, \text{ the energy of the system } E, \quad E = \int dx \left[\frac{1}{2} |\partial_x \psi|^2 + \int_0^{|\psi|^2} ds V(s) \right].$$

Suppose that Eq. (1) admits a soliton solution of the form

$$\psi_s(t, x) = f(x)e^{-i\gamma t}, \quad (3)$$

where real function $f(x)$ gives the soliton profile. It satisfies $f(-x) = f(x)$ and $f(x) \rightarrow 0$ for $|x| \rightarrow \infty$. The soliton frequency is negative, $\gamma < 0$. It determines the binding energy of nonrelativistic particles in a soliton according to the relation

$$dE = \gamma dN, \quad (4)$$

which directly follows from Eqs. (1), (3). The solution is supposed to be classically stable in according to the Vakhitov–Kolokolov stability criterion [6].

Below we will consider a wave packet moving from large negative x to the right and scattering on a soliton (3) centered at $x = 0$,

$$\psi_0 = A(t, x)e^{-i\omega t + ipx + i\phi_0}, \quad \omega = \frac{p^2}{2}, \quad (5)$$

where A specifies a wave packet shape and ϕ_0 is a constant phase. In what follows, we will assume that $|V(A^2)| \ll \omega$, so the wave packet freely propagates to the region of interaction with the soliton. In addition, we will consider wave packets with a width σ much larger than the wavelength, $\sigma \gg 2\pi/p$ so that the change in its shape during movement can be neglected. We solve numerically the nonlinear Schrödinger equation (1) with the potential (2) starting at $t = 0$ with the initial wave function $\psi = \psi_0 + \psi_s$. Here ψ_s is the wave function of the soliton centered at $x = 0$ and ψ_0 is an incident Gaussian wave packet, Eq. (5) with

$$A(0, x) = A e^{-(x-x_0)^2/2\sigma^2}, \quad (6)$$

localized at large negative $x \simeq x_0$ far away from the soliton, where $A = 0.01$, $x_0 = -1500$, $\sigma = 100$ and $p = 1$. The results are demonstrated in the movie [7].

¹⁾Supplementary materials are available for this article at DOI: 10.1134/S0021364024600319 and are accessible for authorized users.

²⁾e-mail: dmitriev.as15@physics.msu.ru

The incident wave packet strikes the soliton and then separates into reflected and transmitted parts. Each part consists of several wave packets moving with different velocities. In particular, the wave packets with maximal amplitudes, transmitted $\psi_1^{(tr)}$ and reflected $\psi_1^{(re)}$, move at the velocity of the incident wave packet $v_1 = \sqrt{2\omega}$. They are the result of quantum-mechanical-like scattering on a potential well produced by a soliton. We have numerically verified that for $A \lesssim 0.01$ the amplitude of $\psi_1^{(re)}$ scales as A , while the amplitudes of ψ_2 and ψ_3 , which appear due to nonlinear interaction of an incident wave packet and a soliton, are proportional to A^2 and A^3 respectively. This fact will be used to construct a perturbation theory with respect to A .

The above argument indicates that the scattering of the wave packet is accompanied by an increase in the number of particles in the soliton. This is confirmed by numerical simulations. The change in the norm of the soliton as a function of the incident wave packet frequency is presented in Fig. 1 by solid line. Surprisingly that this change coincides with high accuracy with the number of particles in the transmitted wave packet $\psi_2^{(tr)}$ (dashed line in Fig. 1),

$$\Delta N_s = N_2^{(tr)}. \quad (7)$$

Considering that $\psi_2^{(tr)} \propto A^2$ the number of particles captured by the soliton is parametrically small, $\Delta N_s \propto A^4$.

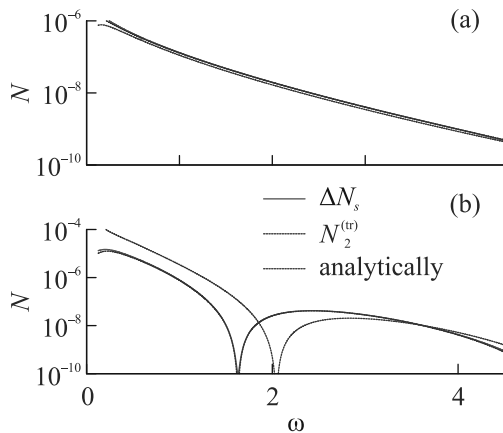


Fig. 1. (Color online) The change in the number of particles of the soliton ΔN_s (red solid lines) with $\gamma = -0.125$ (a) and with $\gamma = -0.1874375$ (b) and the number of particles in the $\psi_2^{(tr)}$ wave packet $N_2^{(tr)}$ (blue dashed lines) as a function of the incident wave packet frequency. The green dotted lines represent the estimation for the norm $\psi_2^{(tr)}$, which was calculated using our analytical method based on the Born approximation

Results. In this study, we have demonstrated that

wave scattering by a soliton is accompanied by the generation of waves with frequencies that are multiples of the incident wave frequency, minus the soliton frequency. Additionally, we have observed that the soliton undergoes growth by absorbing particles from the incident wave into its ground state, while the excited states remain unoccupied. This fact can be understood by adopting the methods of quantum field theory³⁾. The nonlinear self-interaction term $|\psi|^4$ is responsible for scattering of two particles from the incident wave packet into two other states. The occupation number of the soliton ground state is large, thus the transition to this state is strongly Bose-enhanced. Based on the Born approximation, a wave packet with a frequency of $2\omega - \gamma$ is also produced in this process. According to the conservation laws of total energy and total number of particles, it follows that the norm of this wave packet should be equal to the number of particles absorbed by the soliton.

We thank M. Smolyakov and E. Nugaev for numerous discussions and interest in the work.

Funding. This work was supported by the grant Russian Science Foundation 22-12-00215 and, in its numerical part, by the “BASIS” foundation. Numerical calculations were performed on the Computational Cluster of the Theoretical Division of Institute for Nuclear Research of the Russian Academy of Sciences.

Conflict of interest. Authors declare that there is no conflict of interest.

This is an excerpt of the article “Scattering of linear waves on a soliton”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364024600319

1. Y. Kivshar and G. Agrawal, *Optical Solitons: From Fibers to Photonic Crystals*, Elsevier Science, San Diego (2003).
2. Y. H. Ichikawa, Phys. Scr. **20**, 296 (1979).
3. A. Bishop, J. Krumhansl, and S. Trullinger, Physica D: Nonlinear Phenomena **1**(1), 1 (1980).
4. A. Kusenkov and M. Shaposhnikov, Phys. Lett. B **418**(1), 46 (1998).
5. H. A. Haus, F. I. Khatri, W. S. Wong, E. P. Ippen, and K. R. Tamura, IEEE J. Quantum Electron. **32**(6), 917 (1996).
6. N. Vakhitov and A. Kolokolov, Radiophys. Quantum Electron. **16**, 783 (1973).
7. A. Dmitriev, E. Dmitrieva, and A. Panin, <https://youtu.be/XYQlzUEoTfU>, 2023.

³⁾It is important to emphasize that quantum physics is not essential for the soliton-wave interaction.

О стойкости систем квантового распределения ключей типа RFI (Reference Frame Independent) к атакам активного зондирования

С. Н. Молотков^{†*1)}, А. А. Щербаченко^{×°}

[†] Академия криптографии Российской Федерации, 119331 Москва, Россия

^{*} Институт физики твердого тела имени Ю. А. Осипьяна РАН, 142432 Черноголовка, Россия

[×] ООО “СФБ Лаб”, 127273 Москва, Россия

[°] Национальный исследовательский университет “Высшая школа экономики”, 101000 Москва, Россия

Поступила в редакцию 30 ноября 2023 г.

После переработки 12 января 2024 г.

Принята к публикации 24 января 2024 г.

Приведен протокол квантового распределения ключей для волоконных систем, который не требует подстройки оптической части системы на приемной стороне, что существенно упрощает экспериментальную реализацию системы и обеспечивает устойчивую работу даже при разбалансировке оптической части системы на приемной стороне. Получено явное доказательство стойкости протокола с учетом побочных каналов утечки информации.

DOI: 10.31857/S1234567824050112, EDN: IJWXB

1. Введение. Системы квантовой криптографии используются для распределения ключей через волоконные линии связи и через открытое пространство. Стандартное одномодовое волокно, которое используется в волоконных линиях связи, не сохраняет состояние поляризации, поэтому обычно используется не поляризационное, а фазовое кодирование. Для открытого пространства удобнее использовать поляризационное кодирование, поскольку в открытом пространстве поляризация сохраняется.

Фундаментальные законы квантовой механики позволяют связать вероятность ошибки на приемной стороне с верхней границей утечки информации к нарушителю при его атаках на передаваемые квантовые состояния. Системы квантового распределения ключей гарантируют секретность ключей при условии, что вероятность ошибок на приемной стороне не превышают некоторой критической величины. Поскольку принципиально невозможно отличить ошибки на приемной стороне, которые возникают от неидеальностей аппаратуры, от ошибок, вызванных действиями подслушивателя, то все ошибки приходится списывать на действия нарушителя. Для устойчивой работы систем квантовой криптографии важно обеспечить устойчивую работу аппаратуры, т.е. уменьшить вероятность собственных ошибок на приемной стороне из-за неидеальностей аппаратуры.

Одним из источников ошибок при поляризационном кодировании при распределении ключей между стационарными и подвижными (между подвижными) объектами является не строго согласованная ориентация системы координат передающей и приемной станций, что приводит к рассогласованию осей поляризации и появлению ошибок на приемной стороне даже в отсутствии вторжения в канал связи. Согласование координатных осей требует постоянной подстройки взаимной ориентации передающей и приемной станций. При фазовом кодировании на передающей и приемной станциях используются интерферометры, которые должны быть одинаковыми для достижения идеальной безошибочной интерференции на приемной стороне. Для этого также требуется постоянная подстройка интерферометра на приемной стороне, что снижает скорость распределения ключей и усложняет систему.

Одной из задач теории является разработка протоколов квантового распределения ключей, которые не требуют согласования координатных осей в случае поляризационного кодирования и балансировки интерферометра в случае фазового кодирования. Один из таких протоколов был предложен в работе [1]. В [1] был также приведен набросок доказательства стойкости протокола.

Возможны различные атаки на передаваемые состояния. Индивидуальная атака – Ева атакует каждую посылку отдельно, а затем отдельно измеряет

¹⁾ e-mail: sergei.molotkov@gmail.com

свое квантовое состояние. Более эффективная коллективная атака – Ева атакует каждую посылку отдельно, но сохраняет свою квантовую подсистему в каждой посылке в квантовой памяти, а затем производит коллективные измерения над всей последовательностью своих состояний. На первый взгляд, еще более эффективная когерентная атака – Ева атакует сразу всю передаваемую последовательность, используя свое вспомогательное квантовое состояние большой размерности, а затем производя измерение свое квантовой системы. На сегодняшний день установлено (см., например, детали в [2–8]), что когерентная атака не является более эффективной, чем коллективная атака, они эквивалентны. Формальное доказательство основано на квантовом варианте теоремы де Финетти [8]. Неформальная причина состоит в том, что индивидуальные измерения на приемной стороне разрушают сцепленность (запутанность) состояния Евы со всеми передаваемыми состояниями Алисы, что приводит к эффективному “расцеплению” состояния на состояние в отдельных посылках. Поэтому ниже рассматривается коллективная атака Евы.

Системы квантовой криптографии являются открытыми системами, т.е. кроме атак на состояния в квантовом канале связи возможны атаки на передающую и приемную аппаратуру [2]. Часто такие атаки являются более критическими, чем атаки на состояния в канале связи, по этой причине невозможно говорить о стойкости таких систем без учета утечки информации через побочные каналы.

Целью работы является доказательство стойкости RFI протокола с фазовым кодированием с учетом побочных каналов утечки информации.

2. Описание протокола. Общая идея протокола состоит в использовании дополнительного базиса. Напомним, что в стандартном протоколе BB84 используется два базиса. Один из базисов является информационным, два других контрольными.

Состояния в информационном базисе устроены таким образом, что разбалансированность интерферометра на приемной стороне не приводит к ошибкам. Состояния в двух контрольных базисах устроены таким образом, что существует определенный инвариант, который формируется из результатов измерений при рассогласованных осях ориентации или несбалансированном интерферометре и не зависит от рассогласования осей или несбалансированности интерферометра.

В качестве базисных информационных состояний выбираются состояния $|0_Z\rangle$ и $|1_Z\rangle$, локализованные во временных окнах 1 и 2 (рис. 1). Безошибочность

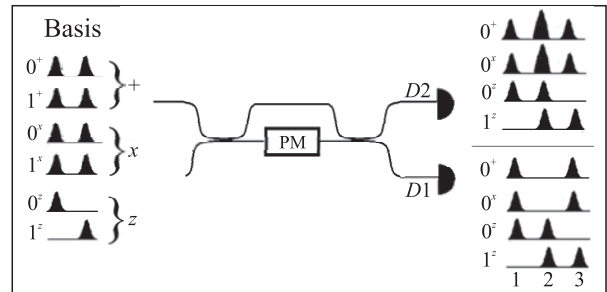


Рис. 1. Состояния, прибывающие на приемную сторону в базисах Z , $+$ и $\times$. Состояния в контрольных базисах $+$ и $\times$ детектируются во временном окне 2. В зависимости от входного состояния деструктивная интерференция для состояния $|0_+\rangle$ имеет место на детекторе $D1$, и конструктивная на детекторе $D2$. Аналогично для состояния $|0_\times\rangle$ в базисе $\times$. Выбор базиса осуществляется выбором фазы на фазовом модуляторе PM . Показана только интерференция для состояний 0 в базисах $+$ и $\times$. Точность интерференции состояний в базисах $+$ и $\times$ зависит от балансировки интерферометра, которая определяет вероятность ошибки. Состояния в информационном базисе Z детектируются во временных окнах 1 или 3 в детекторах $D1$ и $D2$. Безошибочность детектирования состояний в базисе Z не зависит от точности балансировки интерферометра

детектирования состояний в базисе Z не зависит от точности балансировки интерферометра. Данные состояния являются собственными векторами оператора σ_Z , который в базисе собственных векторов имеет вид

$$\sigma_Z = |0_Z\rangle\langle 0_Z| - |1_Z\rangle\langle 1_Z|, \quad (1)$$

с собственными числами 1 и -1 .

Состояния 0 и 1 Алисы и Боба в базисах $+$ и $\times$ будем обозначать соответственно как $|\pm\rangle_{A,B}$ и $|\tilde{\pm}\rangle_{A,B}$, которые выражаются через состояния $|0_Z\rangle$ и $|1_Z\rangle$ в базисе Z как (см. рис. 1):

$$|\pm\rangle_{A,B} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0_Z\rangle_{A,B} \pm |1_Z\rangle_{A,B}), \quad (2)$$

$$|\tilde{\pm}\rangle_{A,B} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0_Z\rangle_{A,B} \pm i|1_Z\rangle_{A,B}). \quad (3)$$

Данные состояния являются собственными состояниями следующих операторов, которые в базисе собственных векторов имеют вид:

$$\sigma_X^{A,B} = |+\rangle_{A,B} \langle +| - |-\rangle_{A,B} \langle -|, \quad (4)$$

$$\sigma_Y^{A,B} = |\tilde{+}\rangle_{A,B} \langle \tilde{+}| - |\tilde{-}\rangle_{A,B} \langle \tilde{-}|, \quad (5)$$

с собственными значениями ± 1 .

Имеется формальное соответствие между базисными состояниями $|+\rangle$ и $|-\rangle$ и базисными состояниями системы координат x и y . Неточность согласования координатных осей Алисы и Боба дается преобразованием координат

$$\begin{aligned} x' &= c_{\beta/2}x + s_{\beta/2}y, & y' &= -s_{\beta/2}x + c_{\beta/2}y, \\ c_{\beta/2} &= \cos(\beta/2), & s_{\beta/2} &= \sin(\beta/2), \end{aligned} \quad (6)$$

где $\beta = \beta_A - \beta_B$ есть неточность установки фазы на стороне Боба (β_B) по отношению к фазе на стороне Алисы (β_A).²⁾ При неточной балансировке интерферометра Боба аналогичным преобразованиям подвергаются состояния $|\pm\rangle_{A,B}$ и $|\pm\rangle_{A,B}$. Соответствующие преобразования операторов $\sigma_{X_\beta}^B$ и $\sigma_{Y_\beta}^B$ имеют вид

$$\sigma_{X_\beta}^B = c_\beta \sigma_X^B + s_\beta \sigma_Y^B, \quad \sigma_{Y_\beta}^B = -s_\beta \sigma_X^B + c_\beta \sigma_Y^B. \quad (7)$$

Отметим, что в преобразование состояний (2), (3) при несогласованности интерферометров Алисы и Боба входит угол $\beta/2$, а в преобразование операторов входит угол β [3]. Для дальнейшего потребуются средние значения от произведения операторов Алисы и Боба – коррелятор $\sigma_{X,Y}^A \sigma_{X_\beta,Y_\beta}^B$ (о физической интерпретации средних значений см. ниже).

Далее считаем, что Алиса оставляет копию посланного к Бобу квантового состояния у себя как эталонную копию. Данное состояние никому, кроме Алисы, недоступно, состояние, посланное к Бобу, подвергается атаке Евы. В результате имеется совместная матрица плотности Алиса–Боб ρ_{AB} . Определим коррелятор как

$$\overline{\sigma_R^A \sigma_{F_\beta}^B} = \text{Tr}_{AB} \{ \rho_{AB} \sigma_R^A \sigma_{F_\beta}^B \}, \quad R, F = X, Y, \quad (8)$$

тогда, с учетом (2)–(8), прямыми вычислениями находим

$$\begin{aligned} & \left(\overline{\sigma_X^A \sigma_{X_\beta}^B} \right)^2 + \left(\overline{\sigma_X^A \sigma_{Y_\beta}^B} \right)^2 + \left(\overline{\sigma_Y^A \sigma_{X_\beta}^B} \right)^2 + \left(\overline{\sigma_Y^A \sigma_{Y_\beta}^B} \right)^2 = \\ & = \left(\overline{\sigma_X^A \sigma_X^B} \right)^2 + \left(\overline{\sigma_X^A \sigma_Y^B} \right)^2 + \left(\overline{\sigma_Y^A \sigma_X^B} \right)^2 + \left(\overline{\sigma_Y^A \sigma_Y^B} \right)^2. \end{aligned} \quad (9)$$

Таким образом, сумма квадратов корреляторов в контрольных базисах $+$ и $-$ не зависит от угла β рассогласования интерферометров Алисы и Боба – является инвариантом. Данный факт будет использован при анализе стойкости протокола.

3. Унитарное представление супероператора. Для учета утечки информации через побочные

каналы требуется явное знание состояний подслушателя. В [1] был приведен набросок доказательства стойкости протокола и была получена формула для длины секретного ключа, однако не прямое доказательство стойкости – без явного получения состояний нарушителя – не позволяет учесть побочные каналы утечки информации (см., например, [2]).

Действия нарушителя сводятся к действию супероператора [4], который переводит исходные квантовые состояния в выходные квантовые состояния – в общем виде в матрицы плотности. Любой супероператор унитарно представим [5] – задается действием унитарного оператора U_{BE} на исходные квантовые состояния и вспомогательное квантовое состояние нарушителя $|E\rangle$. Унитарное представление атаки позволяет получить в явном виде состояния подслушателя. Рассмотрим унитарную атаку на информационные состояния. Действие унитарного оператора на состояния в базисе Z имеет вид

$$|\Psi(0)\rangle_{ABE} = (U_{BE} \otimes I_A) |0_Z\rangle_A \otimes |0_Z\rangle_B \otimes |E\rangle = \quad (10)$$

$$= |0_Z\rangle_A \otimes [\sqrt{1-Q} |0_Z\rangle_B \otimes |\Phi_0\rangle + \sqrt{Q} |1_Z\rangle_B \otimes |\Theta_0\rangle],$$

$$|\Psi(1)\rangle_{ABE} = (U_{BE} \otimes I_A) |1_Z\rangle_A \otimes |1_Z\rangle_B \otimes |E\rangle = \quad (11)$$

$$= |1_Z\rangle_A \otimes [\sqrt{1-Q} |1_Z\rangle_B \otimes |\Phi_1\rangle + \sqrt{Q} |0_Z\rangle_B \otimes |\Theta_1\rangle].$$

Формулы (10), (11) представляют собой разложение по базисным векторам в тензорном произведении пространств состояний Алиса–Боб–Ева. В качестве базисных векторов в пространстве Боба размерностью $\dim \mathcal{H}_B = 2$ выбрана пара ортогональных состояний $|0_Z, 1_Z\rangle_B$. Базисными состояниями в пространстве Евы выбраны состояния $|\Phi_{0,1}\rangle, |\Theta_{0,1}\rangle$. Размерность пространства Евы $\dim \mathcal{H}_E = 4$ (см. детали в [6, 7]), унитарность U_{BE} диктует следующие условия на скалярные произведения [6, 7],

$$\langle \Phi_0 | \Phi_1 \rangle = u, \quad \langle \Theta_0 | \Theta_1 \rangle = v, \quad \langle \Phi_{0,1} | \Theta_{0,1} \rangle = 0, \quad (12)$$

где параметры u, v – скалярные произведения остаются пока свободными.

Сделаем комментарий по выбору параметра Q .

В квантовой криптографии всегда считается, что нарушитель знает параметры системы, в том числе и квантовые эффективности детекторов. Данные знания Ева может использовать при построении своей атаки на состояния – при построении унитарного оператора.

Если квантовые эффективности детекторов одинаковы, то естественно, по соображениям симметрии использовать симметричную атаку по 0 и 1, поэтому параметр Q в (10) и (11) выбран одинаковым.

²⁾Расчет оптического тракта системы представляет стандартную задачу волоконной оптики, см., например, [3].

Если квантовые эффективности разные, то оптимальная (оптимальная в смысле, максимум утечки информации к Еве при заданных наблюдаемых ошибках в канале регистрации 0 и 1) атака, очевидно, не будет симметричной. Даже при одинаковых эффективностях, можно изначально заложить в атаку разные параметры ошибок в каналах 0 и 1, Q_0 и Q_1 , а затем найти максимум утечки по Q_0 и Q_1 . Такую процедуру можно проделать, например, методом работы [7], и использованием неравенства Йенсена и убедиться в оптимальности симметричной атаки. По этой причине, чтобы не усложнять выкладки техническими деталями, рассматриваем симметричную атаку.

Есть еще одно соображение в пользу симметричной атаки при равных эффективностях детекторов. Напомним, что для протокола BB84, именно, на симметричной атаке достигается нижняя граница фундаментальных энтропийных соотношений неопределенностей.

Матрица плотности для информационных посылок в базисе Z имеет вид (чтобы не загромождать выкладки, считаем, что состояния 0 и 1 посылаются равновероятно)

$$\rho_{\text{inf}}(X) = \frac{1}{2} \left(|\Psi(0)\rangle_{ABEABE} \langle \Psi(0)| + |\Psi(1)\rangle_{ABEABE} \langle \Psi(1)| \right). \quad (13)$$

Атака на состояния в других базисах получается из (10), (11) унитарным преобразованием (2), (3) состояний. В базисе $+$ собственных векторов оператора σ_X получаем

$$|\Psi(+)\rangle_{ABE} = (U_{BE} \otimes I_A) |+\rangle_A \otimes |+\rangle_B \otimes |E\rangle = \quad (14)$$

$$= \frac{1}{2} |+\rangle_A \otimes \left\{ |+\rangle_B \otimes [\sqrt{1-Q}|\Phi_+\rangle + \sqrt{Q}|\Theta_+\rangle] + |-\rangle_B \otimes [\sqrt{1-Q}|\Phi_-\rangle + \sqrt{Q}|\Theta_-\rangle] \right\},$$

$$|\Psi(-)\rangle_{ABE} = (U_{BE} \otimes I_A) |-\rangle_A \otimes |-\rangle_B \otimes |E\rangle = \quad (15)$$

$$= \frac{1}{2} |-\rangle_A \otimes \left\{ |-\rangle_B \otimes [\sqrt{1-Q}|\Phi_-\rangle + \sqrt{Q}|\Theta_-\rangle] + |+\rangle_B \otimes [\sqrt{1-Q}|\Phi_+\rangle - \sqrt{Q}|\Theta_+\rangle] \right\},$$

где

$$|\Phi_{\pm}\rangle = |\Phi_0\rangle \pm |\Phi_1\rangle, \quad |\Theta_{\pm}\rangle = |\Theta_0\rangle \pm |\Theta_1\rangle, \quad (16)$$

В базисе $\times$ собственных векторов оператора σ_Y имеем

$$|\Psi(\tilde{+})\rangle_{ABE} = (U_{BE} \otimes I_A) |\tilde{+}\rangle_A \otimes |\tilde{+}\rangle_B \otimes |E\rangle = \quad (17)$$

$$= \frac{1}{2} |\tilde{+}\rangle_A \otimes \left\{ |\tilde{+}\rangle_B \otimes [\sqrt{1-Q}|\Phi_+\rangle + i\sqrt{Q}|\Theta_-\rangle] + |-\rangle_B \otimes [\sqrt{1-Q}|\Phi_-\rangle + i\sqrt{Q}|\Theta_+\rangle] \right\},$$

$$|\Psi(\tilde{-})\rangle_{ABE} = (U_{BE} \otimes I_A) |\tilde{-}\rangle_A \otimes |\tilde{-}\rangle_B \otimes |E\rangle = \quad (18)$$

$$= \frac{1}{2} |\tilde{-}\rangle_A \otimes \left\{ |\tilde{+}\rangle_B \otimes [\sqrt{1-Q}|\Phi_-\rangle - i\sqrt{Q}|\Theta_+\rangle] + |\tilde{-}\rangle_B \otimes [\sqrt{1-Q}|\Phi_+\rangle + i\sqrt{Q}|\Theta_-\rangle] \right\}.$$

Матрица плотности для посылок в контрольных базисах $+$ и $\times$ имеет вид

$$\rho_{\text{contr}} = \frac{1}{2} (\rho_{\text{contr}}(X) + \rho_{\text{contr}}(Y)) = \quad (19)$$

$$= \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{2} (|\Psi(+)\rangle_{ABEABE} \langle \Psi(+)| + |\Psi(-)\rangle_{ABEABE} \langle \Psi(-)|) + \frac{1}{2} (|\Psi(\tilde{+})\rangle_{ABEABE} \langle \Psi(\tilde{+})| + |\Psi(\tilde{-})\rangle_{ABEABE} \langle \Psi(\tilde{-})|) \right\}.$$

4. Вычисление корреляторов. В этом разделе, используя результаты предыдущих разделов, будет приведено вычисление инварианта (9).

Важно отметить, что при подсчете инварианта корреляторы вычисляются на операторах, отвечающих идеальной согласованной балансировке интерферометров Алисы и Боба ($\beta = 0$, см. формулы (9), (10)). Для корреляторов, с учетом (14)–(19), получаем

$$\overline{\sigma_X^A \sigma_X^B} = \text{Tr}_{ABE} \left\{ \frac{1}{2} (\rho_{\text{contr}}(+) + \rho_{\text{contr}}(-)) \sigma_X^A \sigma_X^B \right\} = (1-Q)u + Qv. \quad (20)$$

$$\overline{\sigma_Y^A \sigma_Y^B} = \text{Tr}_{ABE} \left\{ \frac{1}{2} (\rho_{\text{contr}}(\tilde{+}) + \rho_{\text{contr}}(\tilde{-})) \sigma_X^A \sigma_X^B \right\} = (1-Q)u - Qv. \quad (21)$$

Аналогично для остальных средних. Окончательно для инварианта находим

$$C(Q, u, v) = \left(\overline{\sigma_X^A \sigma_X^B} \right)^2 + \left(\overline{\sigma_Y^A \sigma_Y^B} \right)^2 = 2[(1-Q)^2 u^2 + Q^2 v^2]. \quad (22)$$

Данный коррелятор является инвариантом, т.е. не зависит от угла β рассогласования интерферометров. Параметры u, v пока остаются свободными, в дальнейшем будут определяться из условия максимизации утечки информации к подслушивателю (см. ниже).

5. Частичные матрицы плотности. Алиса и Боб оставляют только те послышки, в которых базисы измерений совпадали. После измерений Алисы и Боба в информационном базисе Z матрица плотности принимает вид

$$\begin{aligned} \rho_{X_A X_B E}(Z) = & \quad (23) \\ = \frac{1}{2} |0\rangle_{X_A X_A} \langle 0| \otimes \{ & (1-Q) |0\rangle_{X_B X_B} \langle 0| \otimes |\Phi_0\rangle \langle \Phi_0| + \\ & + Q |1\rangle_{X_B X_B} \langle 1| \otimes |\Theta_0\rangle \langle \Theta_0| \} + \\ + \frac{1}{2} |1\rangle_{X_A X_A} \langle 1| \otimes \{ & (1-Q) |1\rangle_{X_B X_B} \langle 1| \otimes |\Phi_1\rangle \langle \Phi_1| + \\ & + Q |0\rangle_{X_B X_B} \langle 0| \otimes |\Theta_1\rangle \langle \Theta_1| \}. \end{aligned}$$

Частичные матрицы плотности

$$\begin{aligned} \rho_{X_A E}(Z) = & \quad (24) \\ = \frac{1}{2} |0\rangle_{X_A X_A} \langle 0| \otimes \{ & (1-Q) |\Phi_0\rangle \langle \Phi_0| + Q |\Theta_0\rangle \langle \Theta_0| \} + \\ + \frac{1}{2} |1\rangle_{X_A X_A} \langle 1| \otimes \{ & (1-Q) |\Phi_1\rangle \langle \Phi_1| + Q |\Theta_1\rangle \langle \Theta_1| \}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \rho_E(Z) = & \quad (25) \\ = \frac{1}{2} \{ & (1-Q) [|\Phi_0\rangle \langle \Phi_0| + |\Phi_1\rangle \langle \Phi_1|] + \\ & + Q [|\Theta_0\rangle \langle \Theta_0| + |\Theta_1\rangle \langle \Theta_1|] \}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \rho_{X_A X_B}(Z) = & \quad (26) \\ = \frac{1}{2} (1-Q) \{ & |0\rangle_{X_A X_A} \langle 0| \otimes |0\rangle_{X_B X_B} \langle 0| + \\ & + |1\rangle_{X_A X_A} \langle 1| \otimes |1\rangle_{X_B X_B} \langle 1| \} + \\ + \frac{1}{2} Q \{ & |0\rangle_{X_A X_A} \langle 0| \otimes |1\rangle_{X_B X_B} \langle 1| + \\ & + |1\rangle_{X_A X_A} \langle 1| \otimes |0\rangle_{X_B X_B} \langle 0| \}. \end{aligned}$$

Матрица плотности Боба

$$\rho_{X_B}(Z) = \frac{1}{2} \{ |0\rangle_{X_B X_B} \langle 0| + |1\rangle_{X_B X_B} \langle 1| \}. \quad (27)$$

6. Вычисление условных энтропий. Длина секретного ключа в асимптотическом пределе длинных последовательностей определяется через условные энтропии фон Неймана. Для условной энтропии Алиса–Ева в информационном базисе Z с учетом (23)–(27) находим

$$\begin{aligned} H(X_A^Z E | E) &= H(\rho_{X_A E}(Z) | \rho_E(Z)) = \quad (28) \\ &= H(\rho_{X_A E}(Z)) - H(\rho_E(Z)) = \\ &= 1 - \left((1-Q) h\left(\frac{1+u}{2}\right) + Q h\left(\frac{1+v}{2}\right) \right). \end{aligned}$$

Далее, для условной энтропии Алиса–Боб в базисе Z получаем

$$\begin{aligned} H(X_A^Z X_B^Z | X_B^Z) &= H(\rho_{X_A X_B}(Z) | \rho_{X_B}(Z)) = \\ &= H(\rho_{X_A X_B}(Z)) - H(\rho_{X_B}(Z)) = h(Q), \end{aligned} \quad (29)$$

где бинарная энтропийная функция Шеннона $h(x) = -x \log_2(x) - (1-x) \log_2(1-x)$.

7. Длина ключа. Длина секретного ключа есть разность дефицита информации Евы о битовой строке Алисы, при условии, что Ева имеет в своем распоряжении квантовую систему $(\rho(Z)_E)$, коррелированную со строкой Алисы и дефицита информации Боба о битовой строке Алисы, при условии, что Боб имеет битовую строку (X_B) , коррелированную с битовой строкой Алисы (X_A) (см., детали в [8]).

$$\begin{aligned} \ell_Z &= H(X_A^Z E | E) - H(X_A^Z X_B^Z | X_B^Z) = \quad (30) \\ &= 1 - \max_{u,v, C(Q,u,v)} \left((1-Q) h\left(\frac{1+u}{2}\right) + \right. \\ &\quad \left. + Q h\left(\frac{1+v}{2}\right) \right) - h(Q). \end{aligned}$$

Отметим, что в наброске доказательства [1] без детального вывода формула (30) для длины ключа была получена исходя совсем из других рассуждений. Кроме того в [1], полные зависимости длины секретного ключа, а также критическая ошибка протокола, до которой гарантируется секретное распределение ключей, не была приведена.

8. Результаты численных расчетов. Вычисление зависимости длины секретного ключа ℓ_Z требует максимизации утечки информации к подслушивателю по свободным параметрам u, v при условии, что вероятность ошибки в информационном базисе есть Q , и значение инварианта в контрольных базисах есть $C(Q, u, v)$. Инвариант как функция (u, v) представляет собой уравнение эллипса $C^*(Q, u, v) = \frac{C(Q, u, v)}{2} = (1-Q)^2 u^2 + Q^2 v^2$ ($0 \leq C^*(Q, u, v) \leq 1$), и главными осями $(\frac{\sqrt{C^*}}{1-Q}, \frac{\sqrt{C^*}}{Q})$. Параметры u, v меняются в пределах $(0 \leq |u| \leq 1, 0 \leq |v| \leq 1)$.

Заметим, что при любом фиксированном значении вероятности ошибки $Q \in (0, 1)$ функция $\ell_Z^Q(u, v) = 1 - ((1-Q) h(\frac{1+u}{2}) + Q h(\frac{1+v}{2})) - h(Q)$ в указанной области является выпуклой вверх, что следует из положительной определенности ее гессиана

$$\nabla^2 \ell_Z^Q = \frac{1}{\ln 2} \begin{bmatrix} \frac{1-Q}{1-u^2} & 0 \\ 0 & \frac{Q}{1-v^2} \end{bmatrix}$$

при всех возможных значениях u, v внутри единичного квадрата. Минимум функции ℓ_Z^Q ищется вдоль

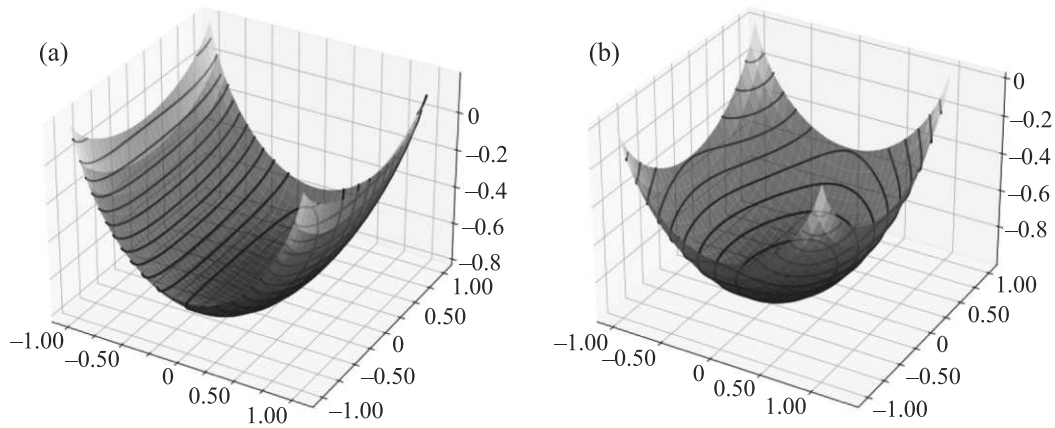


Рис. 2. (Цветной онлайн) Графики поверхности $\ell_Z^Q(u, v)$ при $Q = 0.25$ (a) и $Q = 0.45$ (b). Геодезические линии отвечают кривым на поверхности $C^*(Q, u, v) = C^*$, где C^* принимает значения от 0 с шагом 0.05 и не более $(1 - Q)^2 + Q^2$

геодезической линии $(1 - Q)^2 u^2 + Q^2 v^2 = C^*$. Таким образом, в каждой точке Q решается задача выпуклой оптимизации (с нелинейным ограничением). Применим метод множителей Лагранжа, для этого рассмотрим целевую функцию вида $F_Q(u, v, \lambda) = \ell_Z^Q(u, v) - \lambda((1 - Q)^2 u^2 + Q^2 v^2 - C^*)$. Найдем стационарные точки:

$$\begin{cases} \frac{\partial F_Q}{\partial u} = \frac{1-Q}{2} \log_2 \left(\frac{1+u}{1-u} \right) - 2\lambda(1-Q)^2 u = 0 \\ \frac{\partial F_Q}{\partial v} = \frac{Q}{2} \log_2 \left(\frac{1+v}{1-v} \right) - 2\lambda Q^2 v = 0 \\ \frac{\partial F_Q}{\partial \lambda} = -(1-Q)^2 u^2 - Q^2 v^2 + C^* = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \log_2 \left(\frac{1+u}{1-u} \right) = 4\lambda(1-Q)u \\ \log_2 \left(\frac{1+v}{1-v} \right) = 4\lambda Qv \\ \lambda = \pm \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\log_2^2 \left(\frac{1+u}{1-u} \right) + \log_2^2 \left(\frac{1+v}{1-v} \right)}{C^*}} \end{cases}.$$

Система имеет решение в точках $(u = \pm \frac{\sqrt{C^*}}{1-Q}, v = 0)$ и $(u = 0, v = \pm \frac{\sqrt{C^*}}{Q})$. При $Q < 1/2$ минимум, соответственно, будет достигаться в точке $(u = \pm \frac{\sqrt{C^*}}{1-Q}, v = 0)$. При подстановке получаем следующий вид функции $\ell_Z(Q) = 1 - (1 - Q)h\left(\frac{1-Q+\sqrt{C^*}}{2(1-Q)}\right) - Q - h(Q)$.

В зависимости от значения инварианта C^* , критическая величина ошибки Q_0 достигается при различных условиях. Точный минимум кривой достигается в точке $Q_0 = \frac{1+C^*}{2}$ ($Q_0 = \frac{1+C^*}{2}$ соответственно при $Q > 1/2$), при этом в случае $C^* \geq C_0^*$, где $C_0^* = 0,608313066\dots$ ($Q_0 = 0,195843467\dots$) является решением трансцендентного уравнения $\frac{1+C_0^*}{2} - h\left(\frac{1-C_0^*}{2}\right) - h\left(\frac{(1+\sqrt{C_0^*})^2}{2(1+C_0^*)}\right) = 0$ (точка, в которой функция касается оси абсцисс), данный минимум неотрицателен. При $C^* < C_0^*$ критическая ве-

личина ошибки Q_0 находится из уравнения $1 - (1 - Q_0)h\left(\frac{1-Q_0+\sqrt{C^*}}{2(1-Q_0)}\right) - Q_0 - h(Q_0) = 0$. Таким образом, имеем (при $Q < 1/2$):

$$Q_0 = \begin{cases} \frac{1+C^*}{2}, & C^* \geq C_0^* \\ Q_0 : \ell_Z(Q_0) = 0, & C^* < C_0^* \end{cases};$$

$$\ell_Z(Q_0) = \begin{cases} \frac{1+C^*}{2} - h\left(\frac{1-C^*}{2}\right) - h\left(\frac{(1+\sqrt{C^*})^2}{2(1+C^*)}\right), & C^* \geq C_0^* \\ 0, & C^* < C_0^* \end{cases}$$

Отметим, что минимум функции ℓ_Z^Q существует в том числе при достижении границы единичного квадрата при $|u| = 1$ (достигается при $Q \geq 1 - \sqrt{C^*}$), $v = \pm \sqrt{\frac{C^* - (1-Q)^2}{Q^2}}$. Размерность пространства Евы в таком случае понижается на 1 ($\dim \mathcal{H}_E = 3$) в силу того, что состояния Φ_0, Φ_1 становятся неразличимыми. При увеличении v утечка убывает вплоть до достижения вершины квадрата $|v| = 1$ ($Q = \frac{1-\sqrt{2C^*-1}}{2}$). Графики поверхности $\ell_Z^Q(u, v)$ приведены на рис. 2, соответственно, зависимости длины секретного ключа как функции вероятности ошибки на приемной стороне при разных значениях инварианта $C^*(Q, u, v)$ показаны на рис. 3.

Из наблюдений за положением максимума утечки (минимума длины ключа) при различных значениях C^*, u, v можно сделать выводы об оптимальной стратегии Евы, позволяющие добиться максимальной утечки бит ключа в условиях рассогласования осей. При фиксированном значении инварианта C^* наибольшую информацию Ева получает, когда состояния $|\Theta_0\rangle, |\Theta_1\rangle$ являются ортогональными, что соответствует значению $v = \langle \Theta_0 | \Theta_1 \rangle = 0$, при этом положение состояний $|\Phi_0\rangle, |\Phi_1\rangle$ таково, что $u = \langle \Phi_0 | \Phi_1 \rangle =$

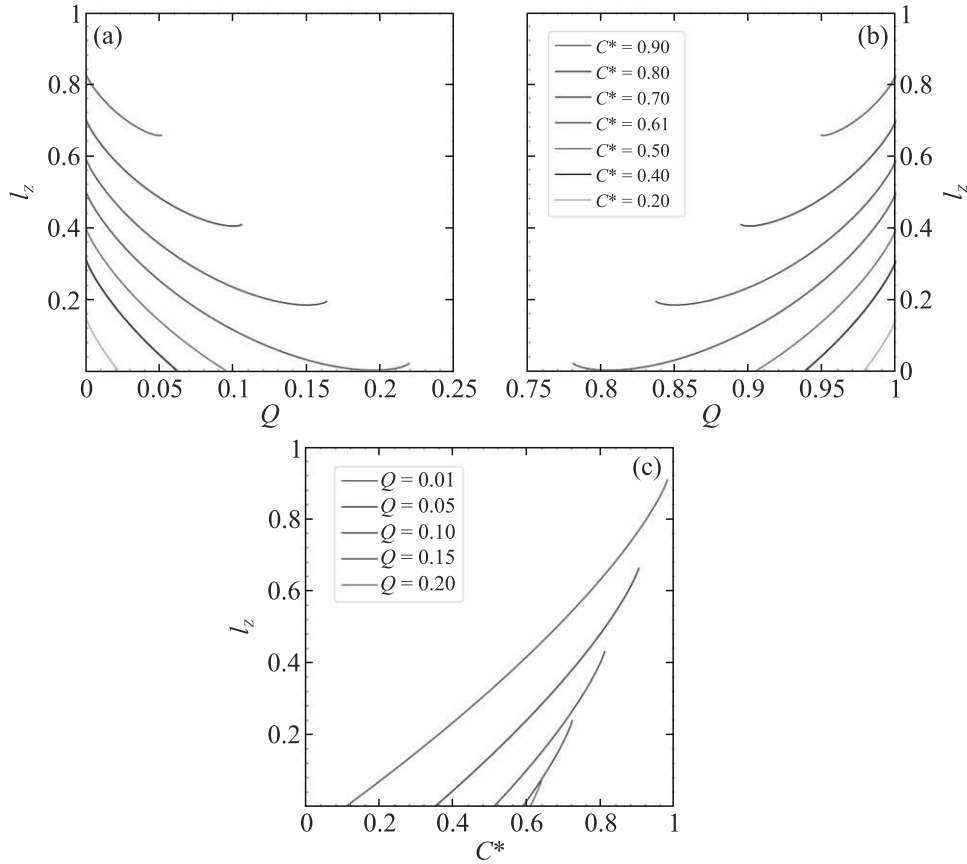


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а), (б) – Зависимости длины секретного ключа как функции вероятности ошибки на приемной стороне при разных значениях инварианта $C^*(Q, u, v)$ (значения для кривых следующие: $C^* = 0.9; 0.8; 0.7; C_0^* \approx 0.61; 0.5; 0.4; 0.2$). (с) – Зависимости длины секретного ключа как функции инварианта C^* при различных значениях ошибки Q (значения вероятности ошибки Q для кривых следующие: $Q = 0.01; 0.05; 0.1; 0.15; 0.2$). Точки окончания кривых соответствуют положению на границе единичного квадрата и отвечают значениям $u^2 = 1$, $C^* = (1 - Q^2)$

$= \frac{\sqrt{C^*}}{1-Q}$. Отметим, что из результатов анализа следует, что существует такое положение осей, что при вероятности ошибки $Q = \frac{1-C^*}{2}$ Ева не может получить больше информации, варьируя значение u .

9. Связь RFI протокола со стандартным протоколом BB84 и физическая интерпретация измерений корреляторов. Протокол RFI является в определенном смысле расширением классического стандартного протокола квантового распределения ключей BB84, поэтому интересно установить связь стойкости RFI протокола со стойкостью BB84.

Как следует из (14)–(18), условная вероятность того, что послано состояние $|+\rangle_A$ и Боб зарегистрировал $|+\rangle_B$ есть

$$\begin{aligned} \Pr(+|+) &= \frac{1}{4} \left| \left[\sqrt{1-Q}|\Phi_+\rangle + \sqrt{Q}|\Theta_+\rangle \right] \right|^2 = \\ &= \frac{1}{2} (1 + (1-Q)u + Qv) = 1 - Q^+, \end{aligned} \quad (31)$$

аналогично послано состояние $|+\rangle_A$ и Боб зарегистрировал $|-\rangle_B$ есть

$$\begin{aligned} \Pr(+|-) &= \frac{1}{4} \left| \left[\sqrt{1-Q}|\Phi_-\rangle + \sqrt{Q}|\Theta_-\rangle \right] \right|^2 = \\ &= \frac{1}{2} (1 - (1-Q)u - Qv) = Q^+, \end{aligned} \quad (32)$$

где Q^+ – вероятность ошибки в базисе $+$. Далее послано состояние $|-\rangle_A$ и Боб зарегистрировал $|-\rangle_B$ есть

$$\begin{aligned} \Pr(-|-) &= \frac{1}{4} \left| \left[\sqrt{1-Q}|\Phi_+\rangle - \sqrt{Q}|\Theta_+\rangle \right] \right|^2 = \\ &= \frac{1}{2} (1 + (1-Q)u + Qv) = 1 - Q^+, \end{aligned} \quad (33)$$

аналогично послано состояние $|-\rangle_A$ и Боб зарегистрировал $|+\rangle_B$ есть

$$\begin{aligned}\Pr(-|+) &= \frac{1}{4} \left| \left[\sqrt{1-Q}|\Phi_{-}\rangle + \sqrt{Q}|\Theta_{-}\rangle \right] \right|^2 = \\ &= \frac{1}{2} (1 - (1-Q)u - Qv) = Q^{+}.\end{aligned}\quad (34)$$

Из энтропийных соотношений неопределенностей [9–13] получаем

$$H(X_A^Z E|E) + H(X_A^+ X_B^+ | X_B^+) \geq 1, \quad (35)$$

соответственно для длины ключа для протокола BB84, с учетом (28) и (35) находим

$$\begin{aligned}\ell_Z &\geq H(X_A^Z E|E) - H(X_A^Z X_B^Z | X_B^Z) \geq \\ &\geq 1 - H(X_A^+ X_B^+ | X_B^+) - H(X_A^Z X_B^Z | X_B^Z) \geq \\ &\geq 1 - h\left((1-Q)\frac{1+u}{2} + Q\frac{1+v}{2}\right) - h(Q) = \\ &= 1 - h(Q^{+}) - h(Q),\end{aligned}\quad (36)$$

где $Q^{+} = (1-Q)\frac{1+u}{2} + Q\frac{1+v}{2}$ – ошибка в сопряженном базисе, и при переходе к последнему неравенству было использовано неравенство Йенсена для энтропии. Приведенные выкладки выше являются прямой демонстрацией известного факта для протокола BB84, который был впервые установлен в работе [14] с использованием квантовых кодов – утечка информации к Еве в прямом базисе выражается через ошибку в сопряженном базисе, или, иначе говоря, фазовая и битовые ошибки совместно определяют длину ключа.

Сравнивая выражения для длины секретного ключа для протокола RFI (30) и протокола BB84 (36), можно установить следующее.

В стандартном протоколе BB84 используется два экспериментальных параметра (точнее оценка параметров) – вероятности ошибок в классическом канале Алиса–Боб в базисе Z и в базисе $+$.

Длину секретного ключа в протоколе BB84 можно получить и через оптимизацию по этим параметрам, но с другими ограничениями. В протоколе BB84 в качестве ограничений используются наблюдаемые величины Q и Q^{*} , а в протоколе RFI величины Q и C .

В протоколе RFI экспериментальными параметрами являются ошибка в информационном базисе Q (точнее оценка вероятности ошибки) и оценка значения корреляторов $C(Q, u, v)$, которая зависит от вероятности ошибки в информационном базисе и двух свободных параметров u, v , по которым проводится максимизация условной энтропии.

Обсудим интерпретацию измерений корреляторов. Фактически величина коррелятора $C(Q, u, v)$

производится следующими измерениями. Пусть измерения проводятся в базисе $+$. Пусть Алиса посылает состояния 0 в базисе $+$, Боб подсчитывает число отсчетов в канале измерений $+$ (см. формулы (14)–(18)), отвечающих регистрации 0 в этом базисе. Далее подсчитывается число отсчетов в канале $-$, отвечающих регистрации 1 в этом базисе. Разность числа отсчетов в каналах 0 и 1 у Боба есть оценка среднего значения коррелятора $C(+) = \overline{|+\rangle_{AA}\langle+|(|+\rangle_{BB}\langle+| - |-\rangle_{BB}\langle-|)}$. Аналогично подсчет происходит, когда Алиса посылала 1 в базисе $+$, в этом случае определяется $C(-) = \overline{|-\rangle_{AA}\langle-|(|+\rangle_{BB}\langle+| - |-\rangle_{BB}\langle-|)}$. Разность значений $C(+)$ – $C(-)$ дает коррелятор $C(+)$ – $C(-) = \overline{\sigma_A^X \sigma_B^X}$. Аналогичным образом определяются остальные корреляторы.

10. Учет побочных каналов утечки информации. Квантовая криптография гарантирует безусловную секретность ключей, если учитывать только атаки на передаваемые квантовые состояния, когда подслушиватель не имеет ни прямого, ни косвенного доступа к передающей и приемной станциям. Системы квантовой криптографии являются открытыми системами, в том смысле, что подслушиватель может иметь косвенный доступ к приемо-передающей аппаратуре, используя зондирующее излучение. Обычно такие атаки называются атаками на техническую реализацию или Trojan-horse attacks [2]. Без устойчивости системы к таким атакам невозможно всерьез говорить о секретности распределяемых ключей. Все атаки на системы квантовой криптографии условно можно разделить на следующие классы:

1. Атаки непосредственно на информационные квантовые состояния в канале связи.
2. Пассивные атаки, использующие детектирование побочного электромагнитного излучения от аппаратуры приемной и передающей станций.
3. Активные атаки, использующие зондирование внешним излучением состояния элементов аппаратуры – фазовых модуляторов, лавинных детекторов, модуляторов интенсивности, детектирование переизлучения лавинных детекторов в линию связи при их срабатывании и т.д.

При учете атак на техническую реализацию напрямую воспользоваться энтропийными соотношениями неопределенностей для вычисления верхней границы утечки информации к подслушивателю оказывается уже невозможным и приходится явно строить всевозможные атаки подслушивателя на квантовые состояния с учетом побочных каналов утечки.

Первый класс атак подразумевает, что подслушатель не имеет ни прямого, ни косвенного доступа к приемо-передающей аппаратуре. Секретность ключей при таких атаках гарантируется фундаментальными ограничениями квантовой теории на различимость квантовых состояний даже при не строго одноквантовом источнике состояний.

Второй класс атак связан с пассивным детектированием слабых (фактически квантовых) побочных сигналов от работы элементов приемной и передающей аппаратуры – излучения от фазовых модуляторов, модуляторов интенсивности, генераторов случайных чисел, от схемы стробирования лавинных детекторов, обратного переизлучения лавинных детекторов при их срабатывании и др.

Третий класс атак использует активное зондирование через волоконную линию связи состояния активных элементов системы, например, фазовых модуляторов, которые несут информацию о передаваемом ключе. Зондирование внешним излучением модуляторов интенсивности представляет собой отдельную задачу, в отличие от зондирования фазовых модуляторов, поскольку состояние модулятора интенсивности в отличие от зондирования фазовых модуляторов не дает “прямой” информации о передаваемом бите ключа, а лишь о состоянии Decoy State – информацию об интенсивности передаваемого состояния.

Четвертый класс – атаки, при которых внешним зондированием изменяют штатную работу элементов, например, лавинных детекторов.

Излучение передающей аппаратуры Алисы и активное зондирование фазового модулятора сводится к введению дополнительного квантового состояния $\rho_A^S(0)$ или $\rho_A^S(1)$, доступного Еве, которое “привязано” к квантовым состояниям Алисы $|0\rangle_{X_A}$ или $|1\rangle_{X_A}$, которые она посылает в канал связи и которое зависит от посылаемого состояния Алисы.

Состояния в побочных каналах от приемной станции зависят от того, какое состояние зарегистрировано Бобом. Если Боб зарегистрировал состояние $|0\rangle_{X_B}$, то Ева в качестве информационного бонуса будет иметь в своем распоряжении состояние $\rho_B^S(0)$, аналогично, если Боб зарегистрировал состояние $|1\rangle_{X_B}$, то Ева дополнительно получает состояние в побочном канале $\rho_B^S(1)$.

Ниже, чтобы проиллюстрировать общий подход учета побочных каналов, мы не разделяем отдельные побочные каналы, а объединяем их в общие матрицы плотности $\rho_A^S(i)$ и $\rho_B^S(i)$ ($i = 0, 1$), которые включают как излучение аппаратуры, зондирование фазового модулятора, обратное излучение (back flash) лавин-

ных детекторов на стороне Боба. Это не уменьшает общности рассмотрения, поскольку каждый побочный канал задается своей матрицей плотности, “суммарный” побочный канал в этом случае также задается суммарной матрицей плотности $\rho_A^S(i)$ и $\rho_B^S(i)$.

Важно отметить некоторые особенности учета побочных каналов. Побочные каналы утечки информации являются дополнительным информационным “бонусом” для Евы. Например, Ева может производить измерение только квантовых состояний в побочных каналах без вторжения в квантовый канал связи, при этом Ева не будет приводить ошибок на приемной стороне, поскольку информационные состояния (а именно, только из “видит” Боб на приемной стороне) остаются невозмущенными.

Энтропийные соотношения неопределенностей связывают ошибки на приемной стороне с утечкой информации к подслушивателю. Из-за того, что измерение состояний в побочных каналах не приводит к ошибкам, то учет побочных каналов находится за пределами энтропийных соотношений неопределенностей, и требуется прямой учет дополнительных каналов, что требует в свою очередь явного вида квантовых состояний.

В общем случае нарушитель имеет доступ к квантовому каналу связи и состояниям в побочных каналах, поэтому в более общей атаке Ева может атаковать как информационные квантовые состояния, и извлекать информацию посредством коллективных измерений сразу над состояниями во всех каналах, что будет приводить, в общем случае, к ошибкам на приемной стороне. По этой причине требуется совместный учет утечек информации по всем каналам, именно, такая ситуация рассмотрена ниже.

Поскольку задача стойкости систем квантовой криптографии с учетом побочных каналов является достаточно сложной, и, на наш взгляд, в полном объеме универсальные подходы к ее решению еще до конца не “выкристаллизовались”, то существуют и опробовываются различные подходы к учету утечек информации с учетом побочных каналов. Один из таких подходов развивается в работе [15] (и ссылки в ней), который основан, фактически, на очищении ЭПР пары (аналогично тому как это делалось в первой работе по RFI системам [1]) вместе состояниями в побочных каналах.

В реальной практике состояния в каждом побочном канале “восстанавливаются” при “калибровке” системы. Например, исследуется отражение от фазового модулятора зондирующих состояний разной интенсивности и спектрального состава. Опре-

деляет верхняя граница интенсивности входных (и соответственно верхняя граница интенсивности отраженных состояний, которые могут быть доступны Еве), при которой еще не происходит “разрушение” системы – плавление волокна. Аналогично для других каналов. В результате такой “томографии” восстанавливается матрица плотности в каждом канале. Это входные данные для анализа стойкости. По этой причине, требуются методы, которые позволяют, явно включать в анализ матрицы плотности в побочных каналах.

Учитывая сказанное и (23)–(26), для матриц плотности для состояний в побочных каналах, получаем (считаем, что вид матриц плотности в побочных каналах установлен “калибровкой” системы, как было отмечено выше)

$$\rho_{X_A X_B ES}(Z) = \quad (37)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} |0\rangle_{X_A X_A} \langle 0| \otimes \rho_A^S(0) \otimes \left\{ (1-Q) |0\rangle_{X_B X_B} \langle 0| \otimes \rho_B^S(0) \otimes \right. \\ &\quad \left. \otimes |\Phi_0\rangle \langle \Phi_0| + Q |1\rangle_{X_B X_B} \langle 1| \otimes \rho_B^S(1) \otimes |\Theta_0\rangle \langle \Theta_0| \right\} + \\ &+ \frac{1}{2} |1\rangle_{X_A X_A} \langle 1| \otimes \rho_A^S(1) \otimes \left\{ (1-Q) |1\rangle_{X_B X_B} \langle 1| \otimes \rho_B^S(1) \otimes \right. \\ &\quad \left. \otimes |\Phi_1\rangle \langle \Phi_1| + Q |0\rangle_{X_B X_B} \langle 0| \otimes \rho_B^S(0) \otimes |\Theta_1\rangle \langle \Theta_1| \right\}. \end{aligned}$$

Далее

$$\rho_{X_A ES}(Z) = \quad (38)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} |0\rangle_{X_A X_A} \langle 0| \otimes \rho_A^S(0) \otimes \left\{ (1-Q) \rho_B^S(0) \otimes \right. \\ &\quad \left. \otimes |\Phi_0\rangle \langle \Phi_0| + Q \rho_B^S(1) \otimes |\Theta_0\rangle \langle \Theta_0| \right\} + \\ &+ \frac{1}{2} |1\rangle_{X_A X_A} \langle 1| \otimes \rho_A^S(1) \otimes \left\{ (1-Q) \rho_B^S(1) \otimes \right. \\ &\quad \left. \otimes |\Phi_1\rangle \langle \Phi_1| + Q \rho_B^S(0) \otimes |\Theta_1\rangle \langle \Theta_1| \right\}. \end{aligned}$$

$$\rho_{ES}(Z) = \quad (39)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} \rho_A^S(0) \otimes \left\{ (1-Q) \rho_B^S(0) \otimes |\Phi_0\rangle \langle \Phi_0| + \right. \\ &\quad \left. + Q \rho_B^S(1) \otimes |\Theta_0\rangle \langle \Theta_0| \right\} + \\ &+ \frac{1}{2} \rho_A^S(1) \otimes \left\{ (1-Q) \rho_B^S(1) \otimes |\Phi_1\rangle \langle \Phi_1| + \right. \\ &\quad \left. + Q \rho_B^S(0) \otimes |\Theta_1\rangle \langle \Theta_1| \right\}. \end{aligned}$$

Здесь мы не конкретизируем явный вид матриц плотности, а используем общие выражения. *Явный*

вид матриц плотности в каждом побочном канале получается в результате специальных исследований побочных каналов для каждой конкретной реализации системы. Имеем

$$\rho_A^S(j) = \sum_i \lambda_{Ai}(j) |\lambda_{Ai}(j)\rangle \langle \lambda_{Ai}(j)|,$$

$$\rho_B^S(j) = \sum_i \lambda_{Bi}(j) |\lambda_{Bi}(j)\rangle \langle \lambda_{Bi}(j)|, \quad (40)$$

значение бита $j = 0, 1$.

Собственные числа матрицы плотности $\rho_{X_A ES}(Z)$

$$\frac{1}{2}(1-Q)\lambda_{Ai}(0)\lambda_{Bj}(0), \quad \frac{1}{2}(1-Q)\lambda_{Ai}(1)\lambda_{Bj}(1), \quad (41)$$

$$\frac{1}{2}Q\lambda_{Ai}(0)\lambda_{Bj}(1), \quad \frac{1}{2}Q\lambda_{Ai}(1)\lambda_{Bj}(0). \quad (42)$$

Собственные числа матрицы плотности $\rho_{ES}(Z)$

$$\Lambda_{ij,1-Q}^{\pm} = (1-Q) \times \quad (43)$$

$$\times \left(\frac{\lambda_{ij}^{00} + \lambda_{i,j}^{11} \pm \sqrt{(\lambda_{ij}^{00} + \lambda_{i,j}^{11})^2 - 4\lambda_{ij}^{00}\lambda_{i,j}^{11}(1-u^2\eta_{i,j,u}^2)}}{2} \right),$$

$$\Lambda_{ij,Q}^{\pm} = Q \times \quad (44)$$

$$\times \left(\frac{\lambda_{ij}^{01} + \lambda_{i,j}^{10} \pm \sqrt{(\lambda_{ij}^{01} + \lambda_{i,j}^{10})^2 - 4\lambda_{ij}^{01}\lambda_{i,j}^{10}(1-v^2\eta_{i,j,v}^2)}}{2} \right).$$

$$\lambda_{ij}^{lm} = \lambda_{Ai}(l)\lambda_{Bj}(m), \quad l, m = 0, 1. \quad (45)$$

$$\eta_{ij,u} = \langle \lambda_{Ai}(0) | \lambda_{Ai}(0) \rangle \langle \lambda_{Bi}(1) | \lambda_{Bi}(1) \rangle,$$

$$\eta_{ij,v} = |\langle \lambda_{Ai}(0) | \lambda_{Ai}(1) \rangle \langle \lambda_{Bi}(1) | \lambda_{Bi}(0) \rangle|. \quad (46)$$

11. Длина ключа с учетом побочных каналов. Длина секретного ключа с учетом побочных каналов получается аналогично разделу 7 выше, как разность условных энтропий фон Неймана, которые вычисляются на матрицах плотности (37)–(39). Используя (40)–(46), приведем выражение для длины ключа ℓ_Z^{side} в информационном базисе Z , находим

$$\ell_Z^{side} = 1 + \sum_{k=0,1} (\chi(\rho_A^S(k)) + \chi(\rho_B^S(k))) - \quad (47)$$

$$\begin{aligned} &- \max_{u,v,C(Q,u,v)} \left\{ (1-Q) \sum_{i,j} \left(\chi(\Lambda_{ij,1-Q}^+) + \chi(\Lambda_{ij,1-Q}^-) \right) + \right. \\ &\quad \left. + Q \sum_{i,j} \left(\chi(\Lambda_{ij,Q}^+) + \chi(\Lambda_{ij,Q}^-) \right) \right\}, \end{aligned}$$

$$\chi(\rho_A^S(k)) = - \sum_i \lambda_{Ai}(k) \log_2(\lambda_{Ai}(k)), \quad (48)$$

$$\chi(\rho_B^S(k)) = - \sum_j \lambda_{Bj}(k) \log_2(\lambda_{Bj}(k)), \quad k = 0, 1,$$

$$\chi(\Lambda_{ij,1-Q}^\pm) = -\Lambda_{ij,1-Q}^\pm \log_2(\Lambda_{ij,1-Q}^\pm), \quad (49)$$

$$\chi(\Lambda_{ij,Q}^\pm) = -\Lambda_{ij,Q}^\pm \log_2(\Lambda_{ij,Q}^\pm).$$

Отметим, что инвариант $C(Q, u, v)$ не зависит от состояний в побочных каналах.

12. Иллюстративный пример. Общие выражения (47)–(49) для длины ключа зависят от структуры состояний в побочных каналах. Интуитивно понятно, что дополнительная информация, полученная Евой из побочных каналов, должна приводить к уменьшению длины секретного ключа. Удобно привести пример, иллюстрирующий данный факт. Пусть зондирующие состояния являются чистыми

$$\rho_A^S(i) = |\mu_i\rangle_{AA}\langle\mu_i|, \quad \rho_B^S(i) = |\mu_i\rangle_{BB}\langle\mu_i|, \quad i = 0, 1, \quad (50)$$

$$|\mu_{ij}\rangle = |\mu_i\rangle_A \otimes |\mu_j\rangle_B, \quad i, j = 0, 1,$$

$$\eta_{lm}^{ij} = {}_{AB}\langle\mu_{ij}|\mu_{lm}\rangle_{AB}, \quad l, m = 0, 1, \quad (51)$$

и пусть скалярные произведения, отвечающие зондирующим состояниям для 0 и 1, одинаковы $\eta = \eta_{lm}^{ij}$. Собственные числа $\rho_{X_A E S}$ матриц плотности (37)–(39) двукратно вырождены и равны

$$\frac{1}{2}(1-Q) \left(\frac{1 \pm u\eta}{2} \right), \quad \frac{1}{2}Q \left(\frac{1 \pm v\eta}{2} \right). \quad (52)$$

Для условных энтропий (28), (29), получаем

$$H(X_A^Z E S | E S) =$$

$$= 1 - \left((1-Q)h\left(\frac{1+u\eta}{2}\right) + Qh\left(\frac{1+v\eta}{2}\right) \right). \quad (53)$$

Длина секретного ключа (54) становится равной

$$\ell_Z^{\text{side}} = H(X_A^Z E S | E S) - H(X_A^Z X_B^Z | X_B^Z) = \quad (54)$$

$$= 1 - \max_{u,v,C(Q,u,v)} \left((1-Q)h\left(\frac{1+u\eta}{2}\right) + \right.$$

$$\left. + Qh\left(\frac{1+v\eta}{2}\right) \right) - h(Q).$$

Как следует из формул (30) и (54), длина ключа при утечке информации по побочным каналам в данном иллюстративном примере масштабируется – получается из (30) заменой $u \rightarrow u\eta$, $v \rightarrow v\eta$, что приводит к масштабированию кривых рис. 2. Различимость состояний в побочных каналах определяется скалярным произведением η между состояниями в побочных каналах, отвечающих 0 и 1. При $\eta = 1$ состояния в побочных каналах полностью неразличимы – состояния для 0 и 1 “слипаются”, поэтому не дают дополнительной информации о ключе по отношению к информации, полученной при атаке только на

передаваемые состояния в квантовом канале связи. При $\eta = 0$ состояния в побочных каналах, отвечающих 0 и 1, ортогональны, поэтому с достоверностью различимы. При этом Ева знает передаваемые состояния из измерений состояний в побочном канале без вторжения в квантовый канал связи, и не производя ошибок на приемной стороне. В этом случае $h\left(\frac{1+u\eta}{2}\right) = h\left(\frac{1}{2}\right) = 1$, $h\left(\frac{1+v\eta}{2}\right) = h\left(\frac{1}{2}\right) = 1$, длина секретного ключа (54) обращается в нуль $\ell_Z^{\text{side}} = 0$ даже при нулевой вероятности ошибки $Q = 0$ на приемной стороне.

Действуя аналогичным образом как в разделе 8, получаем, что при $\eta \geq 1$ ($Q < 1/2$) минимум достигается в точке $u = \pm \frac{\sqrt{C^*}}{\eta(1-Q)}$, $v = 0$, неотрицательный минимум длины ключа при этом достигается в точке $Q_0 = \frac{1-C^*/\eta^2}{2}$ при $C^* \geq C_0^*\eta^2$.

Выражаем благодарность И. М. Арбекову, К. А. Балыгину, С. П. Кулику, А. В. Уривскому, за обсуждения и замечания, а также коллегам по Академии криптографии Российской Федерации, ИнфоТекс и СФБ Лаборатории за обсуждения и постоянную поддержку. Отдельная благодарность А. Н. Климову, который фактически инициировал данное исследование для поддержки экспериментальных работ.

Финансирование работы. Данная работа финансировалась за счет средств бюджета организаций (СНМ – ИФТТ РАН в рамках Госзадания, ААЦ – ООО “СФБ Лаб”). Никаких дополнительных грантов на проведение или руководство данным конкретным исследованием получено не было.

Конфликт интересов. Авторы не имеют конфликта интересов.

1. A. Laing, V. Scarani, J. G. Rarity, and J. L. O'Brien, Phys. Rev. A **82**, 012304 (2010); arXiv/quant-ph:1003.1050.
2. С. Н. Молотков, ЖЭТФ **160**, 327 (2021).
3. openedu.ru/course/kvant-cryptography.
4. K. Kraus, *States, Effects and Operations: Fundamental Notions of Quantum Theory*, Springer Verlag, Berlin (1983).
5. W. F. Stinespring, Proc. Am. Math. Soc. **6**, 211 (1955).
6. С. Н. Молотков, А. В. Тимофеев, Письма в ЖЭТФ **85**, 632 (2007).
7. S. N. Molotkov, Laser Phys. Lett. **18**, 045202 (2021).
8. R. Renner, *Security of Quantum Key Distribution*, PhD thesis, ETH Zürich (2005); arXiv/quant-ph:0512258.
9. D. Deutsch, Phys. Rev. Lett. **50**, 631 (1983).
10. H. Maassen and J. B. M. Uffink, Phys. Rev. Lett. **60**, 1103 (1988).

11. M. Tomamichel and R. Renner, Phys. Rev. Lett. **106**, 110506 (2011).
12. M. Tomamichel, *A Framework for Non-Asymptotic Quantum Information Theory*, PhD thesis, ETH Zürich (2012); arXiv/quant-ph:1203.2142.
13. M. Tomamichel, Ch. Ci Wen Lim, N. Gisin, and R. Renner, *Tight finite-key analysis for quantum cryptography*, Nat. Commun. **3**, 1 (2012).
14. P. Shor and J. Preskill, Phys. Rev. Lett. **85**, 441 (2000).
15. Sh. Sun, Phys. Rev. **104**, 022423 (2021).

Характеристики электромагнитного излучения из образцов кварца, ниобата лития и полиметилметакрилата при их ударном нагружении

А. Д. Костюков⁺, М. А. Карпов^{*1)}

⁺ ФГАОУ ВО «Севастопольский государственный университет», 299053 Севастополь, Россия

^{*} ФГБУН Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 13 января 2024 г.

После переработки 23 января 2024 г.

Принята к публикации 24 января 2024 г.

Представлены результаты исследования процесса образования трещины в образцах монокристаллического кварца, ниобата лития и полиметилметакрилата, сопровождающегося генерацией электромагнитного излучения при распространении ее вдоль объема образцов. Показана корреляция момента начала механического разрушения образцов с интенсивным излучением широкополосного сверхвысокочастотного излучения из них. Измерены частотные характеристики излучения широкополосной антенной и широкополосным осциллографом. Показана корреляция оптических вспышек с импульсами сверхвысокочастотного излучения. Явление связывается с индуцированной триболюминесценцией. Механизм генерации излучения объясняется появлением в образцах трещин с образованием зарядов на их поверхности и последующей автоэлектронной эмиссией за счет образования высокого градиента электрической напряженности поля.

DOI: 10.31857/S1234567824050124, EDN: JMFWLO

Введение. Явление электротриболюминесценции в диэлектриках и возникновение электрических зарядов на их поверхности, сопровождающее данный эффект, достаточно давно известны [1]. Установлены некоторые зависимости характеристик триболюминесценции от кристаллографической ориентации кристалла [2]. Многие авторы связывают явление свечения при разрушении кристаллов с эмиссией с поверхности диэлектрика свободных электронов высоких энергий вследствие появления на границе разрушения электрических полей высокой напряженности [3]. В [4] было показано, что механоакустические колебания среды могут вызывать в ней генерацию высокочастотного электромагнитного излучения. В настоящей работе нами исследованы характеристики СВЧ излучения, возникающего при ударном воздействии на образцы нескольких типов диэлектриков.

Исследования проводились в вакуумной камере методом механического нагружения образцов ударником, толкаемым детонирующей газовой смесью. Синхронно с ударным нагружением образцов регистрировались: давление в образцах пристыкованным к их поверхности пьезодатчиком, динамика свечения трещин в образцах в оптическом диапазоне методом фотохронографии, а также амплитудно-частотные и временные параметры СВЧ излучения из образцов

широкополосной антенной, подключенной к широкополосному осциллографу.

Исторически сложилось, что первые работы по исследованию свечения кристаллов при их механическом разрушении проводились на монокристаллах кварца.

Монокристалл кварца – классический пьезоэлектрик. Его матрица пьезомодулей имеет пять отличных от нуля компонент: d_{11} , d_{12} , d_{14} , d_{25} и d_{26} . Для них выполняются соотношения: $d_{11} = -d_{12}$, $d_{25} = -d_{14}$, $d_{26} = -2d_{11}$. Поляризация при прямом пьезоэффекте описывается уравнением $P_i = d_{ij}\sigma_j$.

Поляризация сопровождается появлением в объеме монокристалла электрического поля, напряженность которого дается выражением $E = \frac{P_i}{\epsilon\epsilon_0}$ (ϵ и ϵ_0 – диэлектрическая проницаемость и электрическая постоянная). Так как электронный пробой развивается по направлению поля, то каналы пробоя должны представлять собой некие протяженные дефекты структуры, перпендикулярные плоской поверхности исходного образца.

Анализ публикаций [5–9] показал, что при воздействии ударной волны или волны сжатия пьезоэлектрики излучают электромагнитное излучение (ЭМИ) в разных частотных диапазонах.

В работах [5, 6] в качестве источников излучения оптического диапазона указывают каналы локальных электрических пробоев в объеме монокристалла

¹⁾ e-mail: karpovma@lebedev.ru

кварца, в [7] триболюминесценцию и (или) электрический пробой. В [8] излучение зарегистрировано в опытах без разрушения образца и при отсутствии образования микротрещин. Вопрос о плазменных струях, описанных в [9], требует дополнительных исследований, так как на сегодняшний день отсутствуют гипотезы, объясняющие данное явление.

Кристаллы ниобата лития, используемые нами в экспериментах, имеют тригональную сингонию и относятся к кристаллографической точечной группе $3m$ ($C3v$) (дигригонально-пирамидальная). Его кристаллическая структура не имеет центральной симметрии, поэтому ниобат лития является сегнетоэлектриком и демонстрирует эффект Поккельса, пьезоэлектрический эффект, фотоупругость и нелинейную оптическую поляризуемость.

Полиметилметакрилат (ПММА), также использованный нами в экспериментах, является органической смолой и не является ни пьезоэлектриком, ни сегнетоэлектриком.

Постановка эксперимента. В экспериментах использовались образцы монокристалла кварца, ниобата лития и ПММА в форме параллелепипеда размером $10 \times 10 \times 20$ мм (рис. 1). Удар по поверхности об-

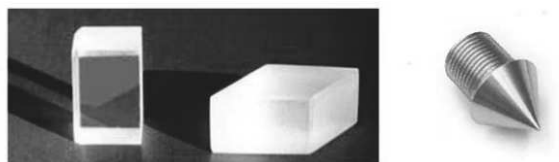


Рис. 1. (Цветной онлайн) Форма исследованных образцов и конический ударник

разцов осуществлялся ударником из тантала конической формы, разогнанным до скорости 300–350 м/с. Ударник толкался детонационной волной, образованной в герметичной камере, наполненной гремучим газом при его поджиге электроразрядом.

С противоположной стороны от удара под образец был подложен электрод, от которого через вакуумный разъем в корпусе ударной трубы были подключены коаксиальные кабели к осциллографу для регистрации образовавшегося на образце электрического заряда. Образец устанавливался в тefлоновый держатель, между держателем и образцом устанавливался датчик давления ПВДФ [10], сигнал с которого выводился через вакуумный разъем на осциллограф. ПВДФ датчик регистрирует динамическое давление с временным разрешением ~ 1 нс.

Регистрация свечения в оптическом диапазоне и процесс образования трещин в образце осуществля-

лась хронографической стрик-камерой через кварцевое окно. СВЧ излучение из образца регистрировалось широкополосной рупорной антенной, подключенной к другому каналу осциллографа (рис. 2).

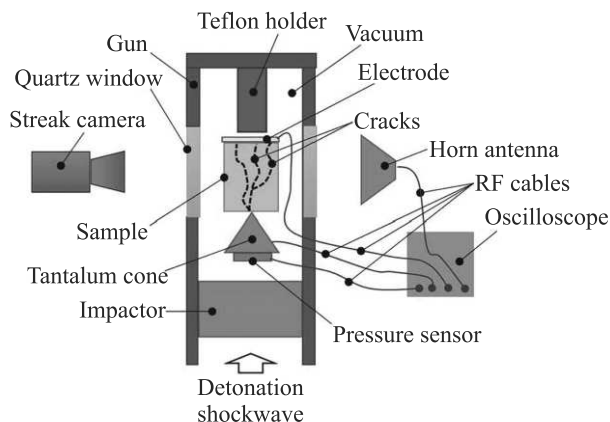


Рис. 2. (Цветной онлайн) Схема проведения эксперимента

Результаты экспериментов. Давление на поверхности образцов в каждом опыте определялось экспериментально и варьировалось от 0.8 до 1.3 ГПа (рис. 3).

Щель стрик-камеры при съемке была ориентирована вдоль предполагаемого направления развития трещины от ударника. При ударе острия распространение трещин по образцу носит примерно прямолинейный характер, интенсивность свечения в оптическом диапазоне имеет мерцающий характер с периодом единицы-доли нс для всех образцов (рис. 4).

В режиме съемки без щели на фотокатод стрик-камеры удалось зарегистрировать свечение на краях развивающейся трещины (рис. 5).

Регистрация сигнала на проводящих обкладках образцов, сформированных ударником и электродом с противоположной стороны образца и сравнение их с сигналом, получаемым рупорной антенной, показывает высокую степень корреляции между ними, кроме образца из ПММА. (рис. 6–8).

Наложенные осциллограммы с антенны и с обкладок для кварца представлены на рис. 9.

При анализе полученных данных было высказано предположение, что при механическом разрушении твердого тела за счет трибоэлектрического эффекта возникает разность электрических потенциалов на краях трещин, достаточная для появления эмиссии электронов с их поверхности. Под действием электрического поля электроны ускоряются, бомбардируют противоположную поверхность трещины, возникает торможение электронов и эмиссия излуче-

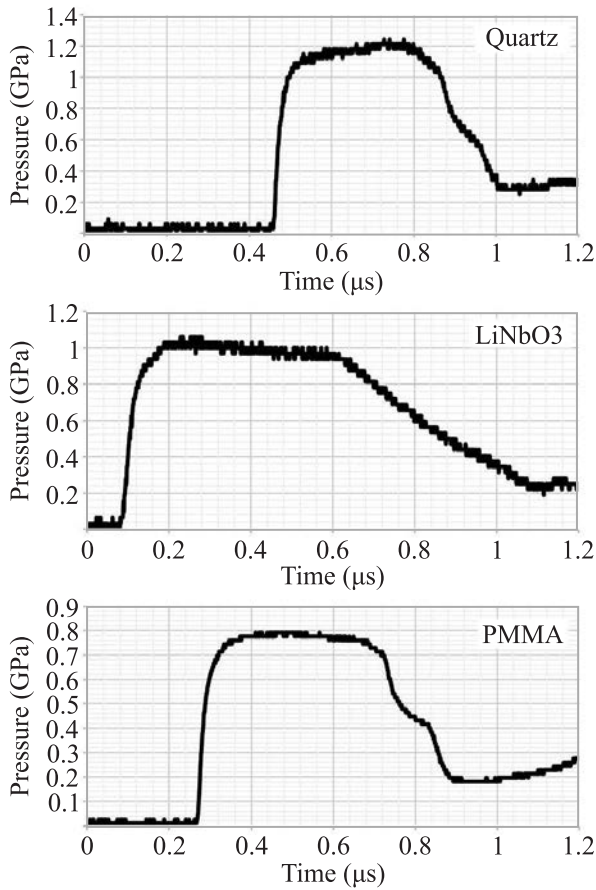


Рис. 3. Профили давлений на плоскости ударника во время нагружения: кварц, ниобат лития, ПММА

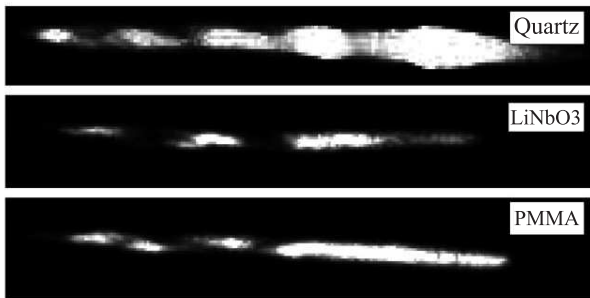


Рис. 4. Хронограмма распространения свечения в трещине: кварц, ниобат лития, ПММА. Ширина щели стрик-камеры 50 мкм, длина развертки 10 нс. Направление развертки: слева направо

ния. По мере прохождения волны разрушения этот эффект многократно повторяется и излучение носит широкополосный и высокочастотный характер.

Обсуждение результатов. Известно, что трещины могут образовываться в изотропной среде только под действием растягивающих напряжений [11]. Однако, при сжатии среды локальные напря-

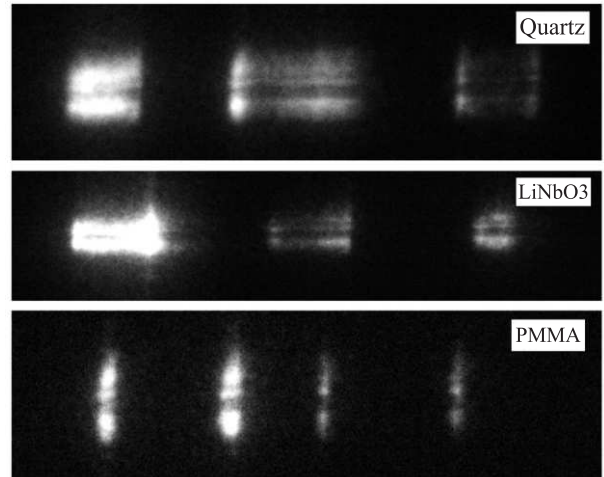


Рис. 5. Хронограмма распространения свечения на краях трещины: кварц, ниобат лития, ПММА. Длина развертки 10 нс. Направление развертки: слева направо

жения вблизи ее неоднородностей, могут стать растягивающими. Если в материале имеются дефекты, вдоль которых облегчены сдвиговые деформации, то при негидростатическом сжатии скольжение материала вдоль границ трещины формирует области избыточного сжатия и растяжения у ее концов. При определенных условиях напряжение оказывается достаточным для инициирования разрушения. Согласно критерию Грффита [12], разрушение материала при сжатии происходит, когда наибольшее локальное растягивающее напряжение достигает порогового значения. Для двухосного напряженного состояния критерий Гриффита имеет вид $2(\sigma_1 - \sigma_2) + 8K(\sigma_1 + \sigma_2) = 0$, где σ_1, σ_2 – главные напряжения, K – константа материала, которая предполагается равной стандартному пределу прочности материала при растяжении.

При одноосном ударном сжатии возрастают как продольная, так и поперечная компоненты напряжений. В упругой области изменение продольного σ_x и поперечного σ_y напряжений происходит согласованным образом: $\sigma_x = \sigma_y(1 - \nu)/\nu$, где ν – коэффициент Пуассона. Порог разрушения быстро возрастает с увеличением поперечного напряжения сжатия и при некотором значении σ_y имеет место так называемый хрупко-пластический переход: сдвиговые напряжения становятся достаточными для возникновения механизмов пластического деформирования, а раскрытие трещин подавляется поперечными напряжениями.

На сегодняшний день не существует единой универсальной теории, объясняющей возникновение электромагнитного излучения (ЭМИ) из подобного

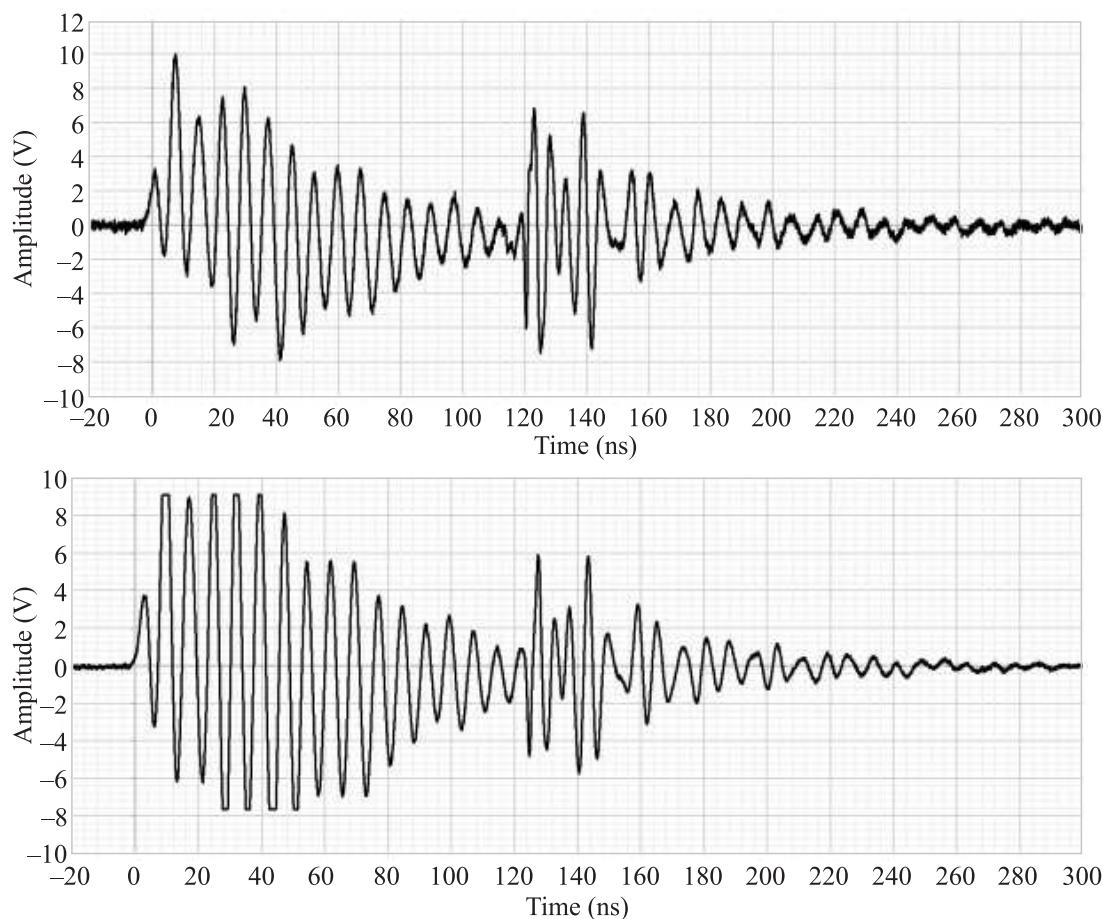


Рис. 6. Сигнал с обкладок (вверху) и сигнал с антенны (внизу) для кварца

рода трещин. Однако, существует несколько полумпирических моделей, позволяющих объяснить механизмы возникновения зарегистрированного нами в экспериментах излучения.

Теория, описанная в [13], говорит, что при распространении трещины электрические заряды на ее границах разделяются по вновь образовавшимся заряженным граням трещины. Причиной такого разделения зарядов называют разрыв химических связей, рассасывание дислокаций и пьезоэлектрические эффекты. Заряд, разделенный вдоль двух границ, приводит к образованию разности потенциалов. Затем заряды рекомбинируют со временем по мере распространения трещины, что соответствует модели линии передачи с рассредоточенным импедансом.

Свойство направленности ЭМИ, обусловленное распространением трещины, может быть объяснено в рамках модели [14]. С использованием предложенной модели трещины, авторами было показано, что во время образования микротрещин электрические потенциалы генерируются перпендикулярно стенкам трещины, магнитная составляющая поля создается

параллельно поверхности трещины, а электромагнитная волна распространяется параллельно направлению распространения трещины.

В модели электрического разряда, возникающего на границах трещины [15] показывается, что при распространении трещины в кристалле происходит стохастическое распределение отрицательных и положительных электрических зарядов по обе стороны границ трещины. Расположение этих электрических зарядов поперек стенок трещины создает электростатическое поле с потенциалом порядка 10^7 В/см. Такой высокий потенциал между границами трещины может привести к электрическому разряду из-за небольшого разделяющего расстояния между границами трещины, а электрический разряд может создавать электромагнитное излучение в том числе и в видимом диапазоне.

Одной из теорий, объясняющих электрический ток, генерируемый в хрупких материалах, является модель движущихся заряженных дислокаций (ДЗД), впервые предложенная в [16]. Согласно этой модели, движение массивов заряженных краевых дис-

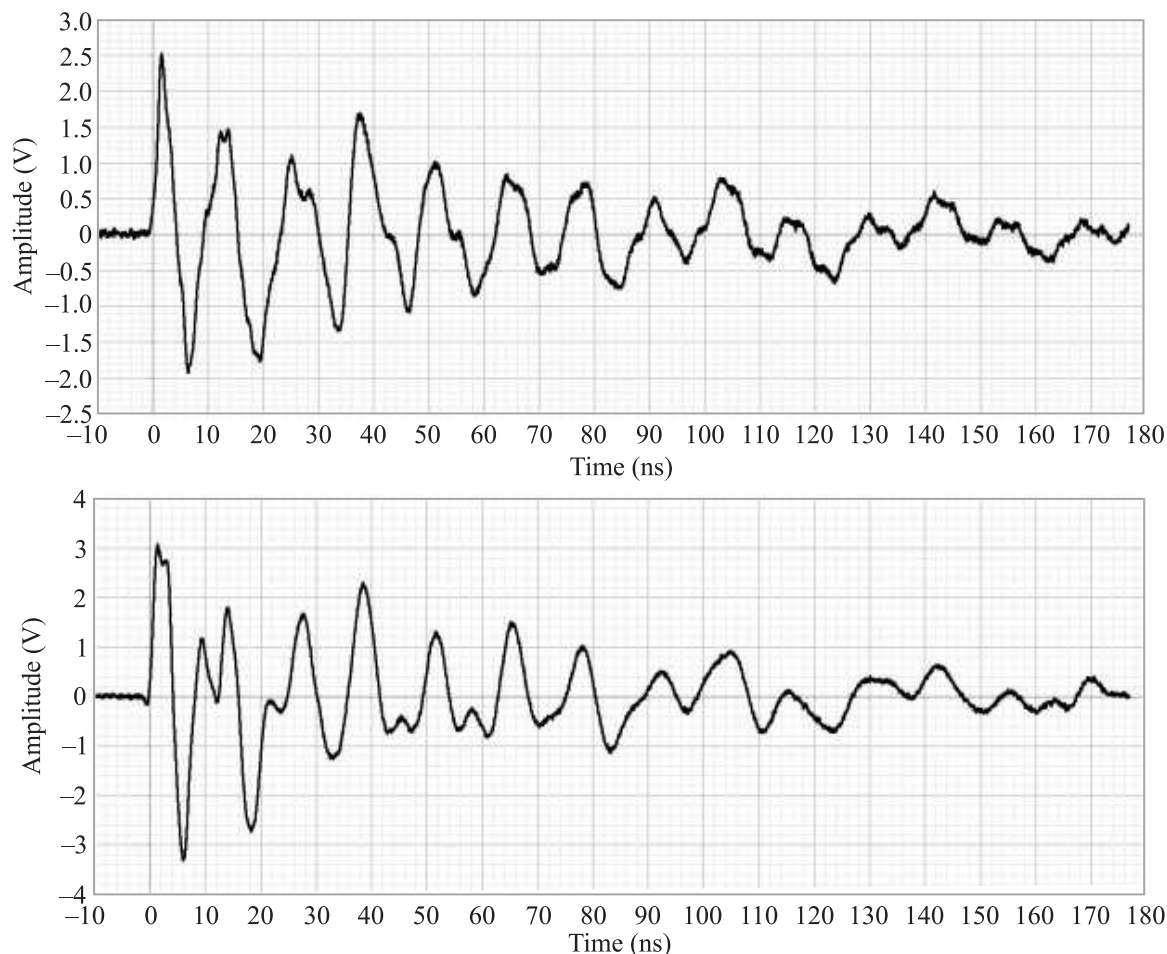


Рис. 7. Сигнал с обкладок (вверху) и сигнал с антенны (внизу) для ниобата лития

локаций при микроразрушении материала приводит к возникновению электрического разряда. Модель ДЗД также объясняет взаимосвязь между плотностью тока и скоростью деформации. Перед разрушением материала напряжения и деформации в нем возрастают, в результате чего начинается микроразрушение с большим количеством распространяющихся вторичных трещин. Эти микротрещины увеличивают количество дислокаций, а также вызывают образование носителей заряда, которые и приводят к возникновению электрического тока. Согласно этой модели, движение дислокаций происходит параллельно приложенному сдвиговому напряжению.

Выводы. Результаты экспериментальных исследований показывают, что скорость распространения трещин в образцах совпадает со скоростью звука в них при достижении критического давления разрушения, при этом эмиссия оптического излучения из трещин имеет мерцающий во времени, модулированный характер с периодом единицы наносе-

кунд. Синхронно с оптическим излучением из распространяющихся трещин в образцах происходит эмиссия электромагнитного излучения СВЧ диапазона, по частоте и амплитуде совпадающая с оптическим мерцанием. Измеренные в ходе эксперимента электрические заряды, возникающие в образцах при их разрушении, по форме, частоте и амплитуде в целом совпадают с оптическим и радиочастотным сигналами.

Полученные результаты позволяют предположить, что явление свечения при механическом разрушении диэлектрических кристаллов связано с возникновением на откольной границе плотного потока свободных электронов, высокого градиента напряженности электрического поля, а механизм излучения связан с торможением электронов в среде и электрическим пробоем на границах развивающейся трещины. Полученные результаты принципиально согласуются с концепцией, изложенной ранее авторами в [17].

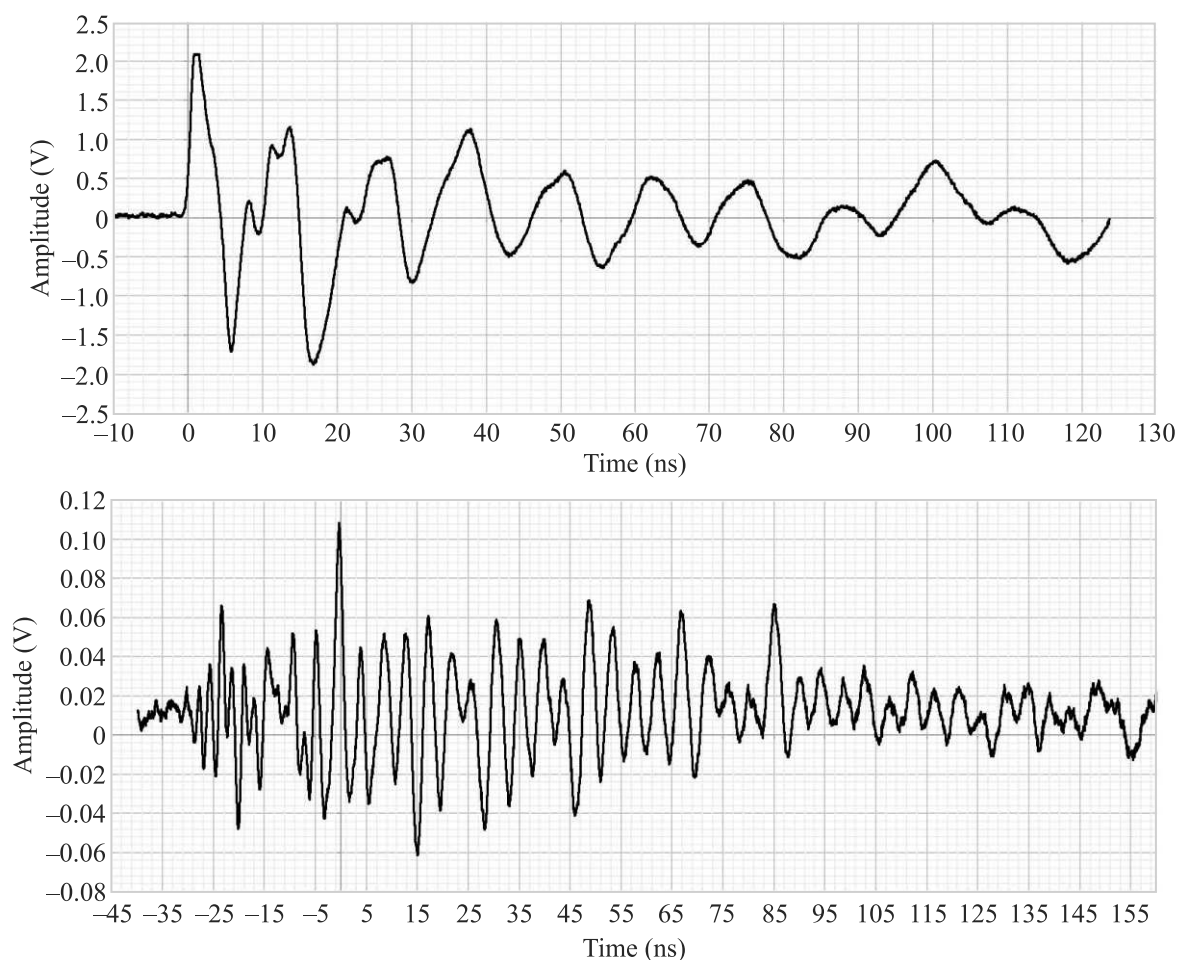


Рис. 8. Сигнал с обкладок (вверху) и сигнал с антенны (внизу) для ПММА

Финансирование работы. Данная работа финансировалась за счет средств бюджета Федерального государственного бюджетного учреждения науки “Физический институт имени П. Н. Лебедева Российской академии наук”. Никаких дополнительных грантов на проведение или руководство данным конкретным исследованием получено не было.

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

1. C. B. P. Chandra, J. Phys. D: Appl. Phys. **10**, 1531 (1977); DOI 10.1088/0022-3727/10/11/017.
2. K. Wang, L. Ma, X. Xu, Shizhu Wen, and J. Luo, Sci. Rep. **6**, 26324 (2016); DOI 10.1038/srep26324.
3. D. Olawale, O. I. Okoli, R. Fontenot, and W. Hollerman, *Triboluminescence: Theory, synthesis, and application*, Springer, Switzerland (2016); ISBN 978-3-319-38842-7; DOI 10.1007/978-3-319-38842-7.
4. M. A. Shevchenko, M. A. Karpov, A. D. Kudryavtseva, D. V. Rozinskii, N. V. Tcherniega, and S. F. Umanskaya,

- Sci. Rep. **11**, 7682 (2021); DOI 10.1038/s41598-021-87389-3.
5. W. P. Brooks, J. Appl. Phys. **36**(9), 2788 (1965); DOI 10.1063/1.1714581.
6. R. A. Graham and W. J. Halpin; J. Appl. Phys. **39**(11), 5077 (1968); DOI 10.1063/1.1655926.
7. P. J. Brannon, C. Konrad, R. W. Morris, E. D. Jones, and J. R. Asay, J. Appl. Phys. **54**(11), 6374 (1983); DOI 10.1063/1.331913.
8. В. И. Веттерген, А. В. Воронин, В. С. Куксенко, Р. И. Мамалимов, И. П. Щербаков, ФТТ **56**(2), 315 (2014).
9. Ю. В. Судьенков, ЖТФ **71**(12), 101 (2001).
10. В. А. Борисенок, В. Г. Симакон, В. А. Брагунец, В. Г. Куропаткин, В. А. Кручинин, В. Н. Ромаев, ФГВ **5**, 109 (2003).
11. Г. И. Канель, *Ударные волны в физике твердого тела*, Физматлит, М. (2018), 208 с; ISBN 978-5-9221-1810-1.
12. A. T. Zehnder, *Griffith Theory of Fracture*, in: Q. J. Wang and Y. W. Chung (editors),

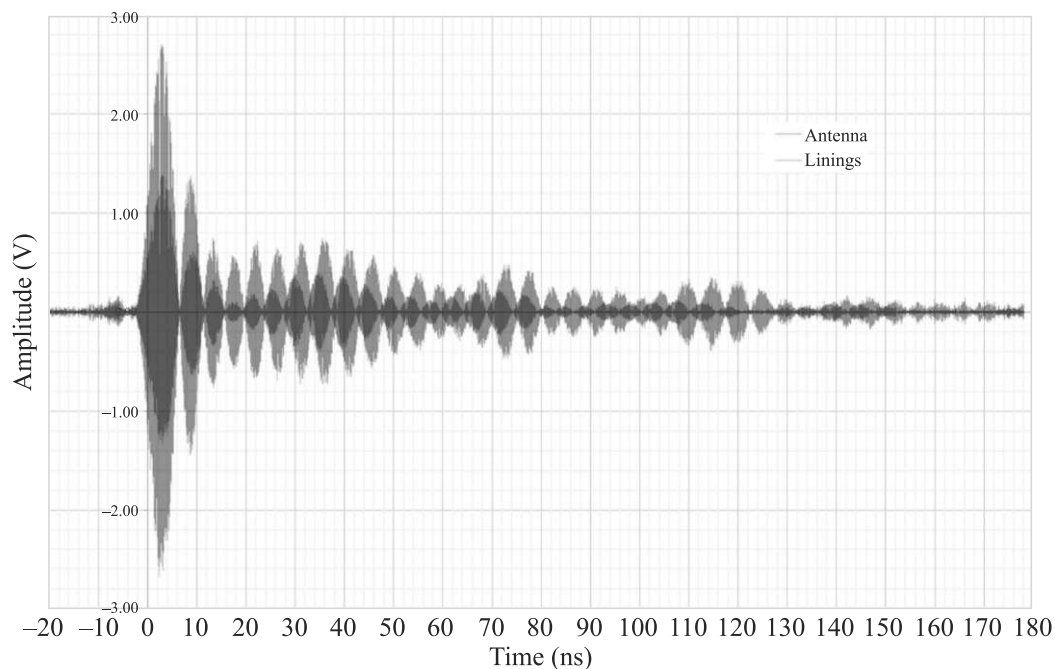


Рис. 9. (Цветной онлайн) Наложенные осциллограммы для кварца с антенны и с обкладок

- Encyclopedia of Tribology*, Springer, Boston, MA; https://doi.org/10.1007/978-0-387-92897-5_259.
13. S. G. O'Keefe and D. V. Thiel, *Journal of Electrostatics* **36**(3), 225 (1996); [https://doi.org/10.1016/0304-3886\(95\)00046-1](https://doi.org/10.1016/0304-3886(95)00046-1).
 14. M. Krumbholz, M. Bock, S. Burchardt, U. Kelka, and A. Vollbrecht, *Solid Earth* **3**, 401 (2012); <https://doi.org/10.5194/se-3-401-2012>, 2012.
 15. В. М. Финкель, Ю. И. Головин, В. Е. Середа, *ФТТ* **17**(3), 770 (1975).
 16. F. Vallianatos and A. Tzanis, *Phys. Chem. Earth.* **23**(9–10), 933 (1998); [https://doi.org/10.1016/S0079-1946\(98\)00122-0](https://doi.org/10.1016/S0079-1946(98)00122-0).
 17. Р. И. Мамалимов, И. П. Щербаков, Р. К. Мамедов, В. И. Веттегрень, *Известия высших учебных заведений. Приборостроение* **56**(7), 69 (2013).

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

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

том 119

Выпуск 6

25 марта 2024

*Журнал издается под руководством
Отделения физических наук РАН*

Главный редактор В. М. Пудалов

Заместители главного редактора

Г. Е. Воловик, В. П. Пастухов

Зав. редакцией *И. В. Подыниглазова*

Адрес редакции 119334 Москва, ул. Косыгина 2

тел./факс (499)-137-75-89

e-mail letters@kapitza.ras.ru

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

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

Прямое многофотонное фемтосекундное ИК-лазерное возбуждение решетки алмаза в двухфононной области и модификация центров окраски

Н. А. Смирнов¹⁾, Ю. С. Гулина, Н. И. Буслеев, П. П. Пахольчук, А. В. Горевой, В. Г. Винс, С. И. Кудряшов

Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 5 января 2024 г.

После переработки 9 февраля 2024 г.

Принята к публикации 17 февраля 2024 г.

Экспериментально исследовано нелинейное поглощение ультракоротких лазерных импульсов с интенсивностями $0.17\text{--}1.7\text{ ТВт/см}^2$ на длине волны собственного двухфононного поглощения (4673 нм) в алмазе типа IIb. Показано, что основным механизмом поглощения в исследуемом образце является двухфотонное поглощение с коэффициентом $\beta_2 = 72 \pm 7\text{ см}^2/\text{ТВт}$. При помощи микроспектроскопии пропускания и фотолюминесценции видимого диапазона, а также инфракрасной фурье-микроспектроскопии продемонстрирована возможность лазерно-индуцированной трансформации азотных примесных центров в искусственном алмазе типа Ib при более высоких интенсивностях излучения.

DOI: 10.31857/S1234567824060016, EDN: KCMSYL

1. С самого момента своего открытия [1], инфракрасное (ИК) излучение связывалось преимущественно с относительно низкоинтенсивным тепловым излучением твердых тел и линейным поглощением оптических фононных мод в прозрачных диэлектрических или полупроводниковых кристаллах [2]. В последние десятилетия появились мощные лазерные источники среднего ИК-диапазона (3–8 мкм, $\approx 40\text{--}100\text{ ТГц}$) – перестраиваемые параметрические генераторы [3, 4] и лазерные генераторы с фиксированной длиной волны [5–7], что позволяет резонансно и многофотонным образом возбуждать колебательные системы молекул [8, 9], белков и даже бактерий [10, 11]. Между тем, в широкозонных диэлектрических и полупроводниковых кристаллах, которые являются перспективными средами для лазерной записи оптических элементов в их объеме через структурную модификацию решетки или примесных дефектов [12–15], даже мощные фемтосекундные лазерные импульсы среднего ИК-диапазона не имеют принципиальных преимуществ перед импульсами ближнего ИК-диапазона (0.8–1.4 мкм, $\approx 200\text{--}400\text{ ТГц}$). Причиной является гигантский – на уровне трех порядков – разрыв между резонансами поглощения электронной подсистемы (ширина запрещенной зоны $\sim 1\text{--}10\text{ эВ}$, $\sim 1\text{ ПГц}$) и ионных колебаний (энергия оптических фононов кристаллической решетки или локальных колебаний примесных атомов – $\sim 0.01\text{--}0.1\text{ эВ}$,

$\sim 10\text{ ТГц}$). В связи с этим существующие источники фемтосекундных лазерных импульсов среднего ИК-диапазона не затрагивают решеточное поглощение, а возбуждают электронную подсистему диэлектриков и полупроводников через механизм ионизации ловушек или прямой туннельной ионизации, сопровождающийся ударной ионизацией вплоть до оптического пробоя (формирования околоритической плазмы) [16, 17].

Алмаз является уникальным оптически- и ИК-прозрачным широкозонным центросимметричным полупроводником (диэлектриком) с самой жесткой кристаллической решеткой, оптические фононы в которой имеют частоту до 40 ТГц [18]. Соответственно, согласно правилам отбора по симметрии, появляется возможность собственного решеточного ИК-поглощения алмаза в двухфононной области (0.33 эВ , 4–5 мкм, 60–80 ТГц), с учетом условия сохранения квазиимпульса [19]. Помимо линейного двухфононного поглощения $\sim 5\text{ см}^{-1}$ ($\approx 4\text{ мкм}$, оптический бифонon) и $10\text{--}100\text{ см}^{-1}$ (другие парные комбинации оптических фононов с коротковолновыми акустическими фононами) в слабых световых полях, в сильных ИК-лазерных полях возможно многофотонное поглощение бифонonных мод алмаза, закономерности которого, возможно, отчасти похожи на таковые для многотомных молекул [8], однако, до сих пор не исследовались.

В настоящей работе методом z-скана изучено нелинейное резонансное поглощение фемтосекунд-

¹⁾e-mail: cna1992@mail.ru

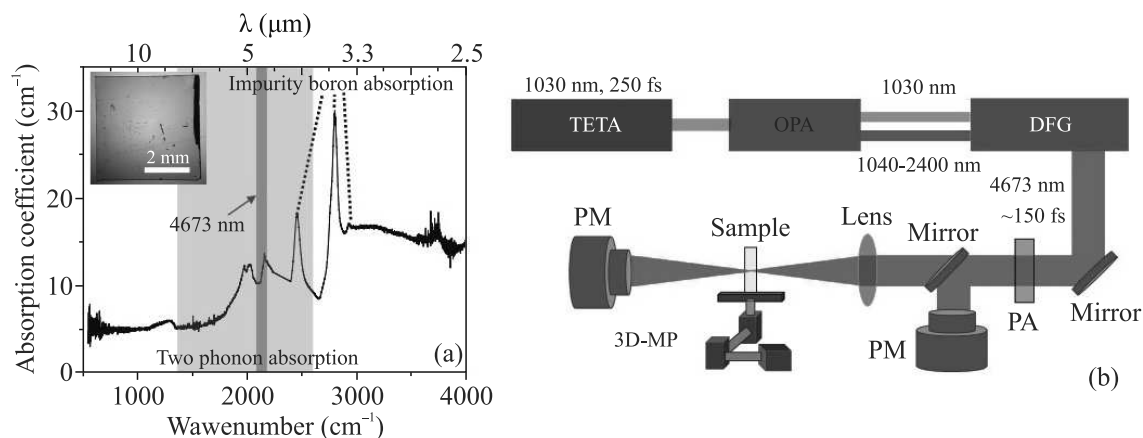


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – ИК-спектр поглощения алмазного образца с обозначением областей двухфононного и примесного поглощения (на вставке – оптическое изображение образца). (б) – Экспериментальная схема установки по облучению алмаза: PM – измеритель мощности; 3D-MP – трехкоординатная моторизованная платформа; PA – инфракрасный поляризатор; Mirror – серебряное зеркало; OPA – оптический параметрический генератор; DFG – генератор разностной частоты; Lens – линза; Sample – алмаз; TETA – лазерный источник фемтосекундных импульсов накачки

ных ИК-лазерных импульсов в полосах двухфононного поглощения синтетического борированного алмаза (без существенного примесного поглощения) и оценена возможность структурной модификации примесных центров синтетического алмаза в этом режиме при более высоких интенсивностях лазерных импульсов.

2. Измерение нелинейного поглощения производилось на алмазе типа Ib ($4 \times 4 \times 0.3$ мм), полученного методом НРНТ (метод высокого давления высокой температуры). Спектр поглощения алмаза в ИК области представлен на рис. 1а, где на графике серой областью выделена двухфононная область поглощения алмаза, красной областью выделена длина волны лазерного излучения (4673 нм), которое использовалось в эксперименте. На графике поглощения алмаза пунктирными черными линиями так же отмечены пики примесного поглощения бора. Оптическое изображение алмаза приведено в виде вставки на рис. 1а. В качестве модифицируемого образца использовался алмаз типа Ib ($3.5 \times 2.2 \times 0.9$ мм), также полученный методом НРНТ, окрашенный в красный цвет после облучения электронным пучком (3 МэВ $5 \times 10^{18} \text{ см}^{-2}$) и 30-минутного отжига при температуре 1200 градусов (рис. 1а) [20].

Облучение образца производилось на длине волны 4673 нм (полуширина ≈ 80 нм), которая была получена с помощью генерации разностной частоты (*difference frequency generation*, DFG) в кристалле AgGaS_2 . Для получения излучения среднего ИК-диапазона излучение холостой длины волны из оптического параметрического генератора PARUS

(Avesta, Russia)) смешивалось с остаточным излучением первой гармоники лазера накачки TETA (Avesta, Russia). Накачка оптического параметрического генератора происходила при мощности 5 Вт и частоте следования лазерных импульсов $\nu = 10$ кГц. Длительность лазерного импульса среднего ИК-диапазона для длины волны 4673 нм составляла $\tau \approx 150$ фс (по уровню 0.5).

Измерение нелинейных оптических характеристик производилось при фокусировке лазерного излучения с помощью линзы из CaF_2 с фокусным расстоянием 40 мм (радиус фокального пятна по $1/e^2$ -уровню энергии $w_0 \approx 37.2$ мкм, длина Рэлея – 930 мкм). Частота следования лазерных импульсов при оценке коэффициентов многофотонного поглощения составляла 10 кГц. Перемещение образца осуществлялось с помощью, моторизованной трехкоординатной платформы с минимальным шагом 1 мкм (рис. 1б). Измерение мощности лазерного излучения производилось с помощью пироэлектрического детектора мощности 3А-Р (OPHIR Optronics Ltd., USA), изменение энергии излучения, падающего на образец, осуществлялось с помощью ИК поляризатора.

Модификация алмаза производилась на длине волны 4673 нм через зеркальный объектив с числовой апертурой $\text{NA} = 0.28$ при фокусировке в объеме алмаза на глубине ~ 200 мкм с разной экспозицией в точке (1, 10, 30, 60, 120, 240 с), частота следования импульсов – 10 кГц при фиксированной плотности энергии, составляющей 2.3 Дж/см^2 . После облучения образец был охарактеризован с

помощью микроспектроскопии пропускания видимого диапазона на микроскопе-спектрометре МСФУ-К (ЛОМО, Россия). ИК-спектры модифицированной области снимались на фурье ИК-спектрометре ФТ-805 с микроскопом Микран-3 (Симекс, Россия). Спектры фотolumинесценции были получены на 3Д-сканирующем конфокальном микроскопе-спектрометре Confotec MR520 (SOL Instruments, республика Беларусь).

3. Основным способом оценки коэффициентов многофотонного поглощения является измерение ослабления энергии лазерного излучения, проходящего через исследуемую среду в дофилamentационном режиме, с последующей обработкой зависимостей нелинейного пропускания. Этот способ реализуется на основе двух основных стандартных методов [21, 22]:

- метод z-scan с открытой апертурой – измерение пропускания образца при фиксированной энергии излучения при смещении образца вдоль оптической оси фокусирующей оптики;

- метод I-scan – измерение пропускания при фиксированном положении исследуемого образца при изменении энергии падающего излучения.

Интенсивность лазерного излучения, прошедшая через образец толщиной L в случае n -фотонного поглощения может быть оценена как [23]

$$I(L) = \frac{(1-R)^2 I_0 \exp(-\alpha L)}{(1 + p_0^{n-1})^{\frac{1}{n-1}}}, \quad (1)$$

где $p_0^{n-1} = (n-1)\beta_n L_{\text{eff}}(1-R)^{n-1} I_0^{n-1}$, β_n – коэффициент n -фотонного поглощения среды, α – коэффициент линейного поглощения, $L_{\text{eff}} = (1 - \exp(-(n-1)\alpha L))/(n-1)\alpha$ – эффективная длина многофотонного поглощения, R – коэффициент отражения на границе раздела “воздух-алмаз”, $I_0 = \frac{2P_0}{\pi w_0^2}$ – пиковая интенсивность лазерного излучения в фокальном пятне, P_0 – пиковая мощность лазерного импульса, $w_0 = \frac{\lambda f'}{\pi w(0)}$ – радиус фокального пятна, λ – длина волны лазерного излучения, $w(0)$ – радиус лазерного пучка перед фокусирующей системой, f' – фокусное расстояние фокусирующей системы.

Из выражения (1) может быть получен коэффициент пропускания образца в схеме z-scan с открытой апертурой [24]

$$T_{\text{OA}}(z) = \frac{1}{1 + (n-1)\beta_n L_{\text{eff}}(1-R)^{n-1} \left(\frac{I_0}{1 + \left(\frac{z}{z_R}\right)^2} \right)^{n-1}}, \quad (2)$$

где $z_R = n_0 \frac{\pi w_0^2}{\lambda}$ – длина Рэлея, n_0 – показатель преломления исследуемого материала. Длина Рэлея для линзы с фокусным расстоянием 40 мм составляет 930 мкм в воздухе и 2210 мкм в материале, что существенно больше, чем толщина образца (0.3 мм), как предполагается в методе z-scan.

На основе экспериментального измерения коэффициента пропускания сфокусированных ультракоротких лазерных импульсов был оценен коэффициент многофотонного поглощения исследуемого образца. В результате аппроксимации экспериментальных данных выражением (2) с различными значениями n было показано, что в исследуемом образце основным механизмом ослабления ультракоротких лазерных импульсов с длиной волны 4763 нм в рассматриваемом диапазоне интенсивностей является двухфотонное поглощение ($n = 2$) с коэффициентом $\beta_2 = 72 \pm 7$ см/ТВт. При оценке данного коэффициента были использованы следующие параметры: показатель преломления алмаза $n_0 = 2.378$ на длине волны $\lambda = 4763$ нм [25], линейный коэффициент поглощения $\alpha = 10$ см $^{-1}$ (рис. 1а), коэффициент отражения на границе раздела воздух-алмаз: $R = \left(\frac{n_0-1}{n_0+1}\right)^2 = 0.166$, коэффициент линейного пропускания: $T_0 = \exp(-\alpha L) = 0.74$. Отметим, что согласно теории многофотонного (не)резонансного ИК-поглощения колебательной системой молекул степень нелинейности поглощения определяется интенсивностью падающего излучения и ограничивается эффектами ангармонизма, плотности состояний и диссоциации [8].

Экспериментально полученные значения коэффициента пропускания в зависимости от смещения положения центра образца от фокальной плоскости линзы вдоль оптической оси, полученные на основе метода z-scan, а также результаты теоретического расчета по формуле (2) для различных мощностей импульсов приведены на рис. 2: (а) – $p = 15.2$ мВт, $P_0 = \frac{P}{\tau\nu} = 10$ МВт, $I_0 = 0.47$ ТВт/см 2 ; (б) – $p = 10.9$ мВт, $P_0 = \frac{P}{\tau\nu} = 7.2$ МВт, $I_0 = 0.34$ ТВт/см 2 .

Для случая двухфотонного поглощения зависимость от интенсивности коэффициент нелинейного пропускания может быть определен как [23]

$$T(I) = \frac{1}{\sqrt{\pi}q_0} \int_{-\infty}^{\infty} \ln(1 + q_0 \exp(x^2)) dx, \quad (3)$$

где $q_0 = 2 L_{\text{eff}}(1-R)I$.

Экспериментально полученные значения коэффициента пропускания образца в зависимости от интенсивности лазерных импульсов, полученные на ос-

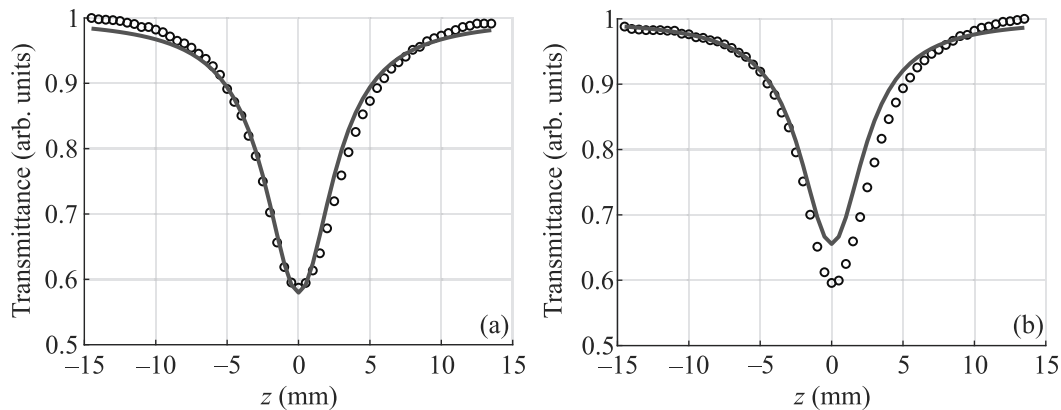


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость коэффициента пропускания от смещения положения центра образца от фокальной плоскости линзы при пиковой мощности импульсов: $P_0 = 10$ МВт (а) и 7.2 МВт (б)

нове метода I-scan, а также результаты теоретического расчета по формуле (3) с использованием оцененного выше коэффициента двухфотонного поглощения приведены на рис. 3.

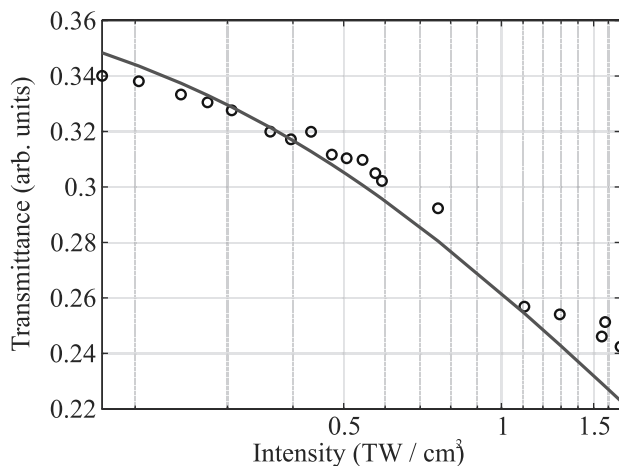


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость коэффициента пропускания образца от интенсивности лазерного излучения

Фемтосекундные лазерные импульсы с длиной волны в диапазоне максимального собственного решеточного поглощения алмазов (в двухфононной области) могут быть использованы для их модификации, что было продемонстрировано на красном НРНТ алмазе, богатом азотными дефектами. При помощи ИК фурье-спектрометра-микроскопа были сняты спектры пропускания модифицированной лазером на длине волны 4673 нм области размером $\sim 200 \times 200$ мкм, где запись производилась в 4 слоя при пиковой плотности энергии 2.3 Дж/см². Спектры были получены при установленной на микроскопе диафрагме 30×30 мкм (рис. 4а) как в обла-

сти модификации, так и рядом с ней, с усреднением по 5 измерениям. При анализе ИК спектров пропускания обнаружено уменьшение поглощения центра 1450 см⁻¹ (Н1а). Центр Н1а характерен для облученных и отожженных алмазов при температуре ниже 1400 °С, а также он сильно проявляется у НРНТ алмазов. В работе [26] показано, что данный дефект соответствует межузельному азоту [N2I]. В модифицированной области поглощение данного пика падает с ~ 1.05 см⁻¹ до ~ 0.75 см⁻¹.

Для измерений оптического пропускания и фотолюминесценции в объеме образца был записан ряд модифицированных микрообластей при той же плотности лазерной энергии 2.3 Дж/см² с различными временами экспозиции. На рисунке 4б справа показаны нормированные спектры пропускания (спектр в области модификации/спектр рядом с областью модификации) при разном времени экспозиции (сплошные линии), а также спектр поглощения алмаза в видимой области спектра (пунктирная линия). В области лазерного воздействия наблюдается “просветление”, т.е. увеличение пропускания, в области 480–650 нм с максимумом в области 580 нм (соответствует нейтральному и отрицательно заряженному азотно-вакансионному центру NV⁰, NV⁻ [18]). Визуализации области лазерного облучения образца с помощью оптического микроскопа в режиме пропускания также показывает “обесцвечивание” алмаза (рис. 4б, слева).

Полученные области также были охарактеризованы с помощью фотолюминесценции при возбуждении непрерывным лазерным излучением с длинами волн 405 и 532 нм (рис. 5). На рисунке 5а представлена карта интенсивности сигнала люминесценции на длине волны 638 нм (NV⁻), где наблюдается снижение интенсивности люминесценции в модифи-

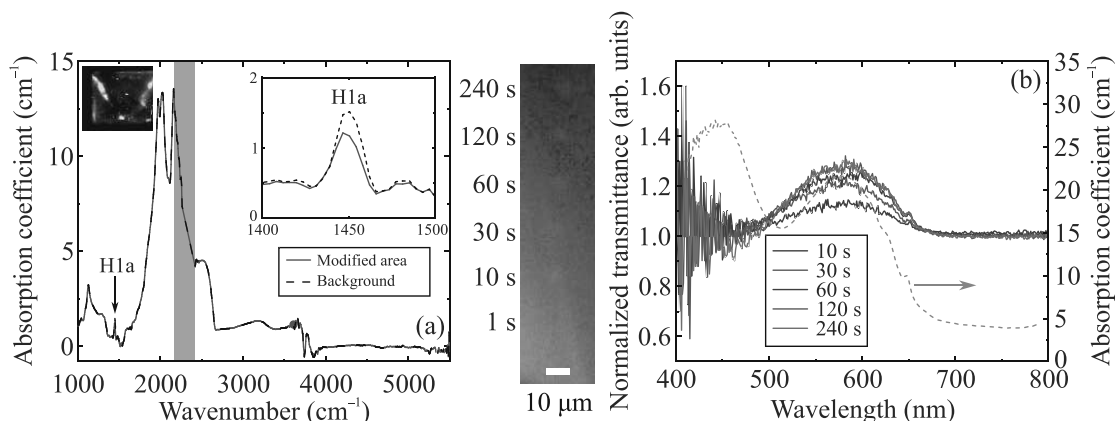


Рис. 4. (Цветной онлайн) (а) – Спектр поглощения алмаза в ИК-диапазоне в области модификации и рядом с ней и его оптическая фотография, полоской обозначена длина волны лазерного воздействия. (б) – Нормированные спектры пропускания (сплошные кривые, левая ось), спектр поглощения алмаза (пунктирная оранжевая кривая, правая ось). Вставка: снимок области модификации с помощью оптического микроскопа в режиме пропускания (слева)

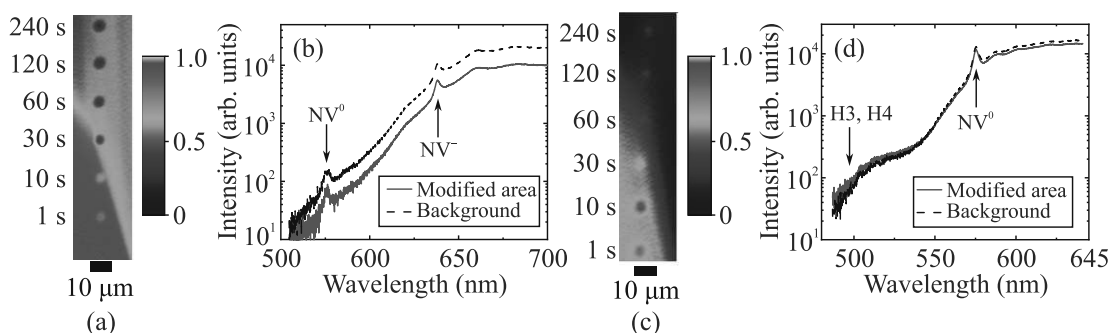


Рис. 5. (Цветной онлайн) Карты интенсивности люминесценции на длине волны 638 нм при возбуждении на длине волны 532 нм (а) и 504 нм при возбуждении на длине волны 405 нм (с), а также спектры фотолюминесценции в области облучения и рядом с ней при возбуждении лазером 532 нм (б) и 405 нм (д)

цированных микрообластях. На спектрах люминесценции (рис. 5b) также наблюдается некоторое снижение люминесценции в области NV⁰ и NV⁻ центров при всех параметрах облучения по сравнению со спектром немодифицированного алмаза.

На рисунке 5с представлена карта интенсивности люминесценции на длине волны 504 нм, а также, в качестве примера, спектры в области модификации для экспозиции 240 с и области рядом (рис. 5d), полученные при возбуждении излучением с длиной волны 405 нм. На карте распределения интенсивности можно заметить, как сильную неоднородность алмаза, так и увеличение фотолюминесценции в модифицированных точках в диапазоне ~500 нм. На спектрах люминесценции наблюдается увеличение интенсивности в модифицированных областях для длин волн 480–520 нм, связанных с центрами окраски Н4 (бесфононная линия (ZPL) при 496 нм) и Н3 (ZPL при 503 нм), с одновременным уменьшением

люминесценции в области центров NV⁰ (> 575 нм) и NV⁻ (> 637 нм). Представленные выше трансформации азотных дефектов в направлении агрегации хорошо соотносятся с известными термическими реакциями [26]. Так, из литературы известно, что NV-центры в НРНТ алмазах могут разрушаться при высоких температурах ~2300 °С, вплоть до полного исчезновения, тогда как Н3- и Н4-центры образуются в синтетических алмазах при температуре выше 1800 °С [27], а центр Н1а начинает переходить в другие формы при температурах выше 1400 °С [27]. Поэтому можно предположить, что в условиях фемтосекундного ИК-лазерного облучения настоящей работы в рамках чисто термического механизма NV-центры становятся подвижными и объединяются в более крупные азотные комплексы, такие как центры Н3 или Н4. Этот механизм принципиально отличается от механизмов модификации азотных примесных центров путем фемтосекундного лазерного меж-

зонного или внутрицентрового электронного возбуждения в алмазах [28, 29] и может иметь перспективные применения в фотонике алмазов. Тем не менее, прямые экспериментальные подтверждения термического механизма трансформации примесных азотных центров и детали его реализации при прямом решеточном поглощении алмаза интенсивного лазерного излучения в среднем ИК-диапазоне еще только предстоит получить.

4. В заключение, в данной работе впервые экспериментально исследовано нелинейное решеточное поглощение в алмазе ультракоротких лазерных импульсов с длиной волны в области собственного двухфононного поглощения. Показано, что нелинейность пропускания алмаза в этом случае обусловлена двухфотонным поглощением. Продемонстрировано, что при воздействии фемтосекундных импульсов с такой длиной волны при более высоких интенсивностях излучения происходит локальная трансформация азотных дефектов.

Финансирование работы. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект # 21-79-30063), <https://rscf.ru/en/project/21-79-30063/>.

Конфликт интересов. Авторы не имеют конфликта интересов.

1. W. Herschel, Abstracts of the Papers Printed in the Philosophical Transactions of the Royal Society of London **1**, 264 (1832).
2. H. Rubens and G. Hertz, Ber. d. Berl. Akad. **256**, (1912).
3. H. Liang, P. Kroger, Z. Wang, H. Park, T. Kroh, K. Zawilski, P. Schunemann, J. Moses, L. F. DiMauro, F. X. Kartner, and K.-H. Hong, Nat. Commun. **8**, 141 (2017).
4. M. Bock, L. von Grafenstein, U. Griebner, and T. Elsaesser, JOSA B **35**, 18 (2018).
5. F. K. Tittel, D. Richter, and A. Fried, *Solid-state mid-infrared laser sources*, Springer, Berlin, Heidelberg (2003).
6. S. Vasilyev, I. Moskalev, M. Mirov, V. Smolski, S. Mirov, and V. Gapontsev, Opt. Mater. Express **7**, 2636 (2017).
7. A. Pushkin, E. Migal, D. Suleimanova, E. Mareev, and F. Potemkin, Photonics **9**, 90 (2022).
8. Г. Н. Макаров, УФН **175**, 41 (2005).
9. T. Stensitzki, Y. Yang, V. Kozich, A. A. Ahmed, F. Kossel, O. Kuhn, and K. Heyne, Nat. Chem. **10**, 126 (2018).
10. I. Pupeza, M. Huber, M. Trubetskov et al. (Collaboration), Nature **577**, 52 (2020).
11. В. О. Компанец, С. И. Кудряшов, Э. Р. Толордава, С. Н. Шелыгина, В. В. Соколова, И. Н. Сараева, М. С. Ковалев, А. А. Ионин, С. В. Чекалин, Письма в ЖЭТФ **113**, 365 (2021).
12. Y. C. Chen, P. S. Salter, S. Knauer, L. Weng, A. C. Frangeskou, C. J. Stephen, S. N. Ishmael, P. R. Dolan, S. Johnson, B. L. Green, G. W. Morley, M. E. Newton, J. G. Rarity, M. J. Booth, and J. M. Smith, Nat. Photon. **11**, 77 (2017).
13. S. Gao, Y. Z. Duan, Z. N. Tian, Y. L. Zhang, Q. D. Chen, B. R. Gao, and H. B. Sun, Opt. Laser Technol. **146**, 107527 (2022).
14. S. Kudryashov, P. Danilov, N. Smirnov, G. Krasin, R. Khmel'nitskii, O. Kovalchuk, G. Kriulina, V. Martovitskiy, V. Lednev, P. Sdvizhenskii, Yu. Gulina, E. Rimskaia, E. Kuzmin, J. Chen, M. Kovalev, and A. Levchenko, Nanomaterials **13**, 192 (2023).
15. S. I. Kudryashov, T. Pflug, N. I. Busleev, M. Olbrich, A. Horn, M. S. Kovalev, and N. G. Stsepuro, Opt. Mater. Express **11**, 1 (2021).
16. P. A. Zhokhov and A. M. Zheltikov, Sci. Rep. **8**, 1824 (2018).
17. E. Migal, E. Mareev, E. Smetanina, G. Duchateau, and F. Potemkin, Sci. Rep. **10**, 14007 (2020).
18. A. M. Zaitsev, *Optical properties of diamond: a data handbook*, Springer Science & Business Media, Berlin (2013).
19. Y. U. Peter and M. Cardona, *Fundamentals of semiconductors: physics and materials properties*, Springer Science & Business Media, N.Y. (2010).
20. S. I. Kudryashov, V. G. Vins, P. A. Danilov, E. V. Kuzmin, A. V. Muratov, G. Yu. Kriulina, J. Chen, A. N. Kirichenko, Yu. S. Gulina, S. A. Ostrikov, P. P. Paholchuk, M. S. Kovalev, N. B. Rodionov, A. O. Levchenko, Carbon **201**, 399 (2023).
21. M. Sheik-Bahae, A. A. Said, T. H. Wei, D. J. Hagan, and E. W. van Stryland, IEEE J. Quantum Electron. **26**, 760 (1990).
22. Ю. С. Гулина, Оптика и спектроскопия **130**, 540 (2022).
23. R. L. Sutherland, *Handbook of nonlinear optics*, Marcel Dekker, N.Y. (2003).
24. T. Wang, N. Venkatram, J. Gosciniaik, Y. Cui, G. Qian, W. Ji, and D. T. Tan, Opt. Express **21**, 32192 (2013).
25. E. D. Palik, *Handbook of optical constants of solids*, Academic press, N.Y. (1998).
26. I. A. Dobrinets, V. G. Vins, and A. M. Zaitsev, *HPHT-treated diamonds*, Springer, Berlin, Heidelberg (2016).
27. H. Kanda and X. Jia, Diamond Relat. Mater. **10**, 1665 (2001).
28. S. I. Kudryashov, P. A. Danilov, N. A. Smirnov, N. G. Stsepuro, A. E. Rupasov, R. A. Khmel'nitskii, E. A. Oleynichuk, E. V. Kuzmin, A. O. Levchenko, Yu. S. Gulina, S. N. Shelygina, I. V. Sozaev, M. S. Kovalev, and O. E. Kovalchuk, Appl. Surf. Sci. **575**, 151736 (2022).
29. G. K. Krasin, S. I. Kudryashov, P. A. Danilov, N. A. Smirnov, A. O. Levchenko, and M. S. Kovalev, Eur. Phys. J. D **75**, 221 (2021).

Deep learning ghost polarimetry

*D. Agapov*¹⁾, *A. Ivchenko*, *S. Magnitskiy*

Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University, 119991 Moscow, Russia

Submitted 12 February 2024

Resubmitted 18 February 2024

Accepted 19 February 2024

DOI: 10.31857/S1234567824060028, EDN: MSLGVA

Introduction. Ghost polarimetry (GP) is one of the important branches of ghost imaging. GP solves the issue of the effect of radiation polarization on the generated polarization ghost images (PGI) [1, 2]. To date, most of the results have been obtained for bright (classical) light. However, in [3–5] it was shown that the ideas underlying GP in bright light can be combined with the principles of quantum optics.

As was shown in [6], for restoring the PGI, i.e. the spatial polarization profile of an object, the measuring a complete set of the correlation intensity functions (CIF) obtained at different orientations of polarizers and analyzers is required. In this regard, a rather complicated problem of solving the inverse problem arises, namely, calculating the elements of the Jones matrix from a set of CIF. However, for an object with arbitrary polarization properties, this problem still remains unsolved and, moreover, it cannot be said in advance that it can be solved in principle.

In this paper, we report for the first time, to our knowledge, about using neural networks to solve GP problem. We demonstrated this for objects with one of four types of anisotropy [7]: linear amplitude anisotropy; linear phase anisotropy; circular amplitude anisotropy and circular phase anisotropy. To address this challenge, we developed a specialized Ghost Polarimetry Deep Neural Network (GPNN) that identifies the type of anisotropy.

Description of optical scheme. For clarity, consider the GP circuit shown in Fig. 1. By analogy with computational ghost imaging [8], a source of linearly polarized light with pseudo-thermal statistics is used. The object's polarization properties are generally described by the Jones matrix $\hat{\mathbf{M}}$. In such a geometry, it is not difficult to show [6] that $g(\mathbf{r}) = \left| \hat{\mathbf{M}}_p \hat{\mathbf{M}}(\mathbf{r}) \mathbf{e}(\mathbf{r}) \right|^2$. Here $g(\mathbf{r})$ – CIF; $\hat{\mathbf{M}}_p$ – Jones matrix of polarizer; $\mathbf{e}$ – the normalized Jones vector.

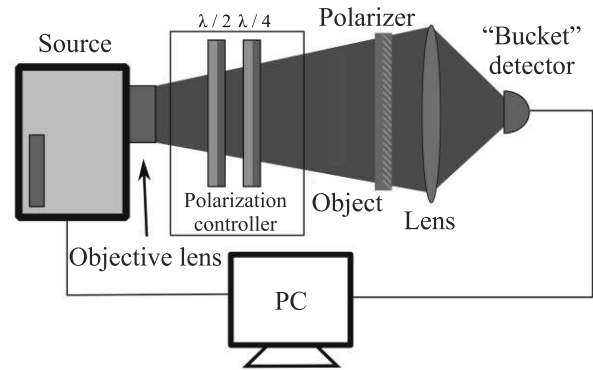


Fig. (Color online) Scheme of the GP facility. Light from a source of linearly polarized radiation with pseudo-thermal statistics (Source) passes through an objective lens, a polarization controller, a polarization-sensitive object, and a polarizer. Then, the light is collected by a lens on a photo-sensitive “bucket” detector area. The control of the source and signal processing from the detector are carried out by a computer (PC)

In the general case, for the objects under consideration, the GP problem with spatial resolution is reduced to an inverse problem, in which it is necessary to restore the distribution of type of anisotropy in the cross section of the object from the measured CIF. To solve this problem, a specialized neural network GPNN was developed, which determines the type of anisotropy point by point. For training and testing we generate a numerical dataset consisting of 7000 points. The vector formed from the five normalized CIF is fed to the input “Embedding stack” consisting of four Linear layer. The new vector is fed to the inputs of the Classifier stack, which solves four binary classification tasks.

As a result of training, we demonstrate a neural network that achieves a prediction accuracy of more than 98 % for the linear and circular amplitude anisotropy by the 19th epoch. A similar epoch yielding a prediction accuracy exceeding 95 % for linear and circular phase anisotropy.

¹⁾e-mail: dimaagapov@mail.ru

Conclusion. For the first time, it is demonstrated that deep neural networks can be utilized to reconstruct distribution of type of the anisotropy of random objects, whose properties are determined by linear and circular amplitude and phase anisotropy. This technique has the potential to be used in solving the quantitative problem of GP, aiming to determine the value of anisotropy parameters (P , θ , α , Δ , ϕ and R).

Funding. This work is supported by the Russian Science Foundation under grant # 21-12-00155.

Conflict of interest. The authors declare no conflicts of interest.

This is an excerpt of the article “Deep learning ghost polarimetry”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364024600368

1. D. Shi, S. Hu, and Y. Wang, Opt. Lett. **39**(5), 1231 (2014).
2. D.-F. Shi, F. Wang, H. Jian, C. Kai-Fa, K. Yuan, H. Shun-Xing, and W. Ying-Jian, Opt. Rev. **22**, 882 (2015).
3. S. Magnitskiy, D. Agapov, and A. Chirkin, Opt. Lett. **47**(4), 754 (2022).
4. A. Vega, T. Pertsch, F. Setzpfandt, and A. A. Sukhorukov, Phys. Rev. Appl. **16**(6), 064032 (2021).
5. S.-J. Yoon, J.-S. Lee, C. Rockstuhl, C. Lee, and K. G. Lee, Metrologia **57**(4), 045008 (2020).
6. S. Magnitskiy, D. Agapov, and A. Chirkin, Opt. Lett. **45**, 3641 (2020).
7. S. N. Savenkov, V. V. Marienko, E. A. Oberemok, and O. Sydoruk, Phys. Rev. E **74**(5), 056607 (2006).
8. J. H. Shapiro, Phys. Rev. A **78**(6), 061802 (2008).

Пылевая плазма у поверхности Энцелада – спутника Сатурна

Д. В. Шохрин⁺, С. И. Копнин*, С. И. Попель⁺⁺¹⁾

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

^{*}Институт космических исследований РАН (ИКИ РАН), 117997 Москва, Россия

Поступила в редакцию 4 февраля 2024 г.

После переработки 15 февраля 2024 г.

Принята к публикации 16 февраля 2024 г.

Показано, что в приповерхностном слое над освещенной частью спутника Сатурна – Энцелада за счет фотоэлектрических и электростатических процессов происходит формирование пылевой плазмы. На основе физико-математической модели для самосогласованного описания концентраций фотоэлектронов и пылевых частиц над поверхностью освещенной части Энцелада определены функции распределения фотоэлектронов у его поверхности, найдены высотные зависимости концентрации пылевых частиц, их зарядов и размеров, а также электрических полей. Отмечается, что несмотря на удаленность Энцелада от Солнца, фотоэффект оказывается важным процессом при формировании пылевой плазмы. Показано, что концентрация фотоэлектронов над поверхностью Энцелада на порядок может превосходить концентрацию электронов и ионов солнечного ветра, а размеры левитирующих пылевых частиц превышают характерные размеры пылевых частиц, поднимающихся над поверхностью Луны.

DOI: 10.31857/S123456782406003X, EDN: NFGBPA

Хотя Энцелад – лишь шестой по размеру спутник Сатурна и четырнадцатый по удаленности от него среди 146 известных спутников этой планеты, как показали исследования, выполненные с помощью космических аппаратов “Вояджер-1”, “Вояджер-2” и “Кассини”, он весьма примечателен с точки зрения разного рода проявлений. Прежде всего, Энцелад считается одним из самых вероятных мест в Солнечной системе для существования внеземной микробной жизни [1]. Далее, полагают, что кольцо Е Сатурна, состоящее из микроскопических частиц льда или пыли, пополняется веществом с Энцелада [2]. В рамках измерений, выполненных “Кассини”, в окрестности Энцелада наблюдали плазменно-пылевое образование [3], существование которого, по-видимому, связано с действием криовулканов в южной полярной области Энцелада и выбросами вещества с его поверхности во время метеорных ударов. Криовулканы испускают фонтаны частиц льда, а также других составляющих, в том числе, силикатных частиц, часть из которых попадает на поверхность Энцелада, а другая – уходит в космос [2]. Важными аспектами исследований, связанными с Энцеладом, являются геологическая активность [4], ландшафт поверхности [5], подповерхностный жидкий водный океан [6] и т.д. Таким образом, Энцелад со всеми его проявлениями является важным объектом исследований. На-

ряду с большим количеством теоретических работ, основанных, как правило, на данных “Вояджеров” и “Кассини”, начиная с 2022 г., после запуска NASA’s James Webb Space Telescope, Энцелад исследуется с помощью этого телескопа [7].

Энцелад – фактически первый объект во внешней области Солнечной системы, в окрестности которого удалось наблюдать пылевую плазму [3, 8–10]. Этот спутник Сатурна, подобно Луне, является безатмосферным космическим телом. Фактически общепринятым в настоящее время считается, что пыль над лунной поверхностью является составной частью плазменно-пылевой системы (см., например, [11–18]). Ожидается, что аналогичная ситуация складывается и над поверхностью Энцелада. Поверхность Энцелада заряжается под действием электромагнитного излучения Солнца и плазмы солнечного ветра. При взаимодействии с солнечным излучением поверхность Энцелада испускает электроны вследствие фотоэффекта, что приводит к формированию над поверхностью слоя фотоэлектронов. К появлению фотоэлектронов приводит также их испускание пылевыми частицами, присутствующими над поверхностью Энцелада, вследствие взаимодействия последних с электромагнитным излучением Солнца. Пылевые частицы, находящиеся на поверхности Энцелада или в приповерхностном слое, поглощают фотоэлектроны, фотоны солнечного излучения, электроны и ионы солнечного ветра. Все эти процессы приводят к

¹⁾e-mail: popel@iki.rssi.ru

зарядке пылевых частиц, их взаимодействию с заряженной поверхностью Энцелада, подъему и движению пыли.

В ситуации с Энцеладом имеются и существенные отличия от условий на Луне. Так, поверхность Луны покрыта пылью, которая состоит из несвязанных друг с другом небольших крупинок реголита, образовавшегося в результате микрометеоритной бомбардировки. Именно эта пыль поднимается над поверхностью Луны и, в конечном итоге, участвует в формировании плазменно-пылевой системы [17]). Поверхность Энцелада покрыта водяным льдом. Однако, поскольку плотность Энцелада составляет 1.61 г/см^3 , считается, что его недра содержат большой процент силикатов и железа. Таким образом, следует ожидать присутствия мелкодисперсных частиц (пыли) разнообразного состава на поверхности Энцелада, образованных в результате дробления вещества Энцелада вследствие ударов метеороидов. Кроме того, источником пыли на поверхности Энцелада является кольцо Е Сатурна, частицы которого (мелкодисперсный лед) попадают на поверхность Энцелада. Далее, одной из причин существования пыли на Энцеладе является тектоническая активность [19], приводящая к напряжениям сдвига и выделениям мелкодисперсных частиц. Наконец, как уже отмечалось, часть частиц льда и силикатных частиц, испускаемых криовулканами, попадает на поверхность Энцелада.

Работы [3, 8–10] посвящены, в основном, рассмотрению пыли над Энцеладом на значительных высотах h , больших характерного линейного размера Энцелада ($R \approx 252 \text{ км}$). Практически нет данных о параметрах пыли в приповерхностном слое ($h \ll 100 \text{ км}$). По аналогии с ситуацией у Луны можно ожидать, что основная часть пылевых частиц содержится именно в приповерхностном слое над Энцеладом, где образование пылевой плазмы связано с процессами зарядки пылевых частиц, их взаимодействием с заряженной поверхностью Энцелада, подъемом и движением заряженной пыли в электрическом и гравитационном полях, а скорости пылевых частиц существенно меньше 10 м/с . В настоящей работе проводится описание свойств пылевой плазмы в приповерхностном слое над освещенной частью Энцелада. Вычисляются электрические поля, а также параметры фотоэлектронов и пыли над поверхностью Энцелада.

Для описания плазменно-пылевой системы в приповерхностном слое освещенной части Энцелада используется модель [20], в которой зарядка пылевых частиц над поверхностью Энцелада вычисляется с

учетом влияния фотоэлектронов, электронов и ионов солнечного ветра, а также солнечного излучения. Не учитывается воздействие светового давления на динамику пылевых частиц, поскольку, как показывают оценки, указанное воздействие сказывается лишь для частиц с размерами, заведомо не превышающими 1 нм . Производится учет фотоэлектронов как от поверхности Энцелада, так и от поверхностей парящих над ней пылевых частиц. Рассмотрение фотоэлектронов от поверхностей пылевых частиц требует самосогласованного описания, поскольку фотоэлектроны влияют на распределения пылевых частиц, в то время как распределения пылевых частиц определяют количество фотоэлектронов. Ввиду самосогласованного характера задачи решить ее удастся только численными методами.

Для нахождения концентраций фотоэлектронов над поверхностью Энцелада производится решение системы уравнений, состоящей из стационарного кинетического уравнения для функции распределения фотоэлектронов и уравнения Пуассона для электростатического потенциала с соответствующими граничными условиями, характеризующими поведение потенциала у поверхности Энцелада и на бесконечном удалении от нее. Функция распределения фотоэлектронов по энергиям у поверхности Энцелада Φ_e определяется стандартным образом [21] на основе расчета плотности потока фотоэлектронов, испускаемых твердым телом под действием излучения:

$$\Phi_e(E_e)dE_e = 2 \cos \theta \sqrt{\frac{2m_e}{E_e}} \int_{E_e+W}^{\infty} Y(E_{ph}) F_{ph} d\rho dE_{ph}, \quad (1)$$

где E_e – энергия фотоэлектрона, E_{ph} – энергия фотона, W – работа выхода фотоэмиссии, θ – угол между местной нормалью и направлением на Солнце, m_e – масса электрона, $Y(E_{ph})$ – квантовый выход, зависящий от энергии фотонов, $F_{ph} dE_{ph}$ – число фотонов солнечного излучения с энергией E_{ph} в интервале dE_{ph} , пересекающих в единицу времени единичную площадку, перпендикулярную к направлению движения фотонов,

$$d\rho = \frac{6(E_m - E_e)}{E_m^3} E_e dE_e, \quad 0 \leq E_e \leq E_m = E_{ph} - W$$

– вероятность [21] того, что в результате поглощения фотона энергии E_{ph} испускается электрон с энергией E_e в интервале энергий dE_e . Коэффициент “2” в правой части (1) обусловлен тем, что в стационарном состоянии количества электронов, покидающих и поглощаемых поверхностью твердого тела, равны друг другу. При выводе (1) пренебрегалось воз-

можной анизотропией функции распределения фотоэлектронов в пространстве скоростей, обусловленной неровностью поверхности Энцелада.

Функция распределения (1) может быть использована для нахождения концентрации N_0 и температуры T_e фотоэлектронов у поверхности Энцелада:

$$N_0 = \int_0^\infty \Phi_e(E_e) dE_e, \quad (2)$$

$$T_e = \frac{2}{3} \langle E_e \rangle \equiv \frac{2}{3N_0} \int_0^\infty E_e \Phi_e(E_e) dE_e. \quad (3)$$

При вычислении функции распределения фотоэлектронов, их концентрации и температуры важными параметрами являются спектр солнечного излучения, квантовый выход и работа выхода поверхности Энцелада. Поскольку материал поверхности Энцелада представляет собой водяной лед, в качестве ее работы выхода используем величину $W = 8.7$ эВ [22], а для квантового выхода – зависимость $Y(E_{ph}) = C_Y (E_{ph} - W)^2$ [23] с $C_Y = 10^{-4}$ эВ $^{-2}$. Что касается спектров солнечного излучения, их форма соответствует форме спектров у Луны [24, 25], однако интенсивность оказывается меньшей, что обусловлено значением Солнечной постоянной, которое на орбите Сатурна составляет 15.0 Вт/м 2 , т.е. примерно 1.1 % от значения Солнечной постоянной на орбите Земли. Соответственно спектры солнечного излучения и на орбите Сатурна существенно варьируются в течение одиннадцатилетнего цикла солнечной активности. Однако, как и в ситуации с Луной (см. [25]), несмотря на вариации количества энергии, излучаемой Солнцем в ультрафиолетовом диапазоне (основном с точки зрения испускания фотоэлектронов) в указанном цикле не происходит существенных (на порядки величины) изменений значений N_0 и T_e . Поэтому ниже проводятся вычисления для солнечного максимума. На рисунке 1а приведен спектр, характеризующий солнечную активность на орбите Сатурна, соответствующий солнечному максимуму. Параметры фотоэлектронов (N_0 , T_e), рассчитанные по формулам (1)–(3), в приповерхностном слое освещенной части Энцелада для солнечной активности, соответствующей солнечному максимуму, и значению работы выхода $W = 8.7$ эВ имеют следующие значения: $N_0 \approx 1.26 \cos \theta$ см $^{-3}$; $T_e \approx 7.89$ эВ. На рисунке 1б изображена функция распределения $f_e(E_e) \equiv \Phi_e(E_e)/N_0$, нормированная на единицу ($\int_0^\infty f_e(E_e) dE_e = 1$), вычисленная для данных, соответствующих $W = 8.7$ эВ и солнечному максимуму. Имеется сильное отличие указанной функции распределения от максвелловской.

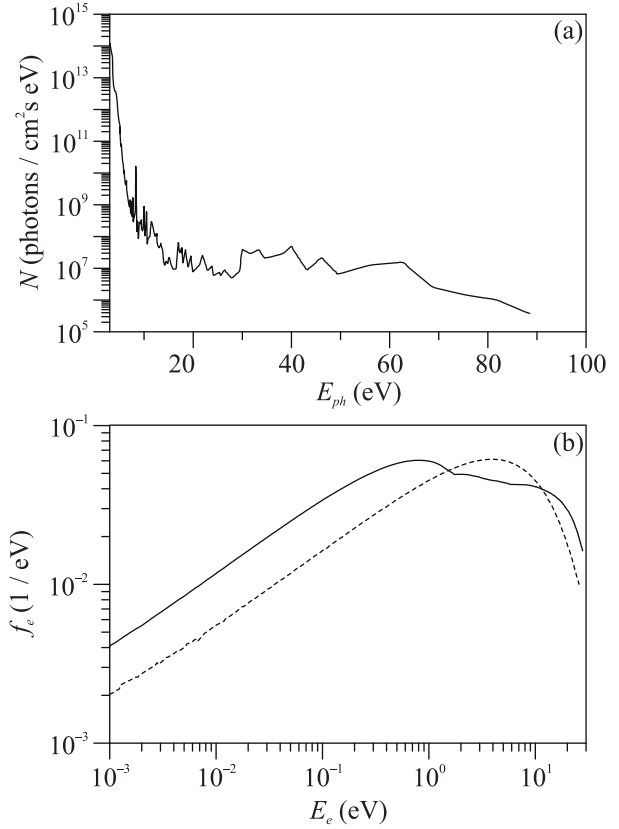


Рис. 1. Поток солнечного излучения на орбите Сатурна в зависимости от энергии фотонов (в логарифмическом масштабе), соответствующий солнечному максимуму (а). Функция распределения фотоэлектронов f_e по энергиям (сплошная кривая) у освещенной части поверхности Энцелада, соответствующая солнечному максимуму, и максвелловское распределение (пунктирная кривая), вычисленное для значений средней энергии фотоэлектронов, характеризующих распределение, изображенное сплошной кривой (б)

Поведение пылевых частиц, которые для простоты описания считаем ледяными (для силикатных частиц результаты качественно не меняются), в приповерхностном слое описывается уравнениями, описывающими их динамику и зарядку:

$$m_d \frac{d^2 \mathbf{r}_d}{dt^2} = q_d \mathbf{E} + \frac{q_d}{c} \mathbf{v}_d \times \mathbf{B} + m_d \mathbf{g}_0, \quad (4)$$

$$\frac{dq_d}{dt} = I_e(q_d) + I_i(q_d) - I_{ph}(q_d) + I_{e,ph}(q_d), \quad (5)$$

где m_d – масса пылевой частицы; q_d – ее заряд; $\mathbf{g}_0$ – ускорение свободного падения у поверхности Энцелада; $\mathbf{E}$ – электрическое поле; $\mathbf{B}$ – магнитное поле Сатурна у поверхности Энцелада; $I_e(q_d)$ и $I_i(q_d)$ – микроскопические токи на пылевую частицу электронов и ионов солнечного ветра, $I_{ph}(q_d)$ –

фототок электронов с пылевой частицы, обусловленный ее взаимодействием с солнечным излучением, $I_{e,ph}(q_d)$ – ток фотоэлектронов на пылевую частицу:

$$I_e \approx -\pi a^2 n_{eS} \sqrt{\frac{8T_{eS}}{\pi m_e}} \left(1 + \frac{Z_d e^2}{a T_{eS}}\right), \quad (6)$$

$$\begin{aligned} I_i &\approx \pi a^2 n_{iS} \sqrt{\frac{T_{iS}}{2\pi m_i}} \frac{u_{Ti}}{u_i} \\ &\times \left\{ \frac{u_i + u_0}{u_{Ti}} \exp\left(-\frac{(u_i - u_0)^2}{2u_{Ti}^2}\right) + \frac{u_i - u_0}{u_{Ti}} \exp\left(-\frac{(u_i + u_0)^2}{2u_{Ti}^2}\right) \right\} \\ &+ \pi a^2 n_{iS} \sqrt{\frac{T_{iS}}{4m_i}} \frac{u_{Ti}}{u_i} \left\{ \operatorname{erf}\left(\frac{u_i + u_0}{\sqrt{2}u_{Ti}}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{u_i - u_0}{\sqrt{2}u_{Ti}}\right) \right\} \left(1 + \frac{2Z_d e^2}{a T_{iS}} + \frac{u_i^2}{u_{Ti}^2}\right), \quad (7) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} I_{ph} &\approx -\pi a^2 e N_0 \sqrt{\frac{T_{e,ph}}{2\pi m_e}} \\ &\times \left(1 + \frac{Z_d e^2}{a T_{e,ph}}\right) \exp\left(-\frac{Z_d e^2}{a T_{e,ph}}\right), \quad (8) \end{aligned}$$

$$I_{e,ph} \approx -\pi a^2 e n_{e,ph} \sqrt{\frac{8T_{e,ph}}{\pi m_e}} \left(1 + \frac{Z_d e^2}{a T_{e,ph}}\right). \quad (9)$$

Здесь a – размер пылевой частицы, Z_d – ее зарядовое число ($q_d = Z_d e$), e – элементарный заряд, $n_{e(i)S}$ – концентрация электронов (ионов) солнечного ветра, $T_{e(i)S}$ – температура электронов (ионов) солнечного ветра, m_i – масса иона, $u_0 = \sqrt{2Z_d e^2 / a m_i}$, $u_{Ti} = \sqrt{T_{iS} / m_i}$ – тепловая скорость ионов солнечного ветра, u_i – скорость солнечного ветра, $T_{e,ph}$ – температура фотоэлектронов, а $n_{e,ph}$ – концентрация фотоэлектронов, учитывающие фотоэлектроны как с поверхности Энцелада, так и с поверхностей пылевых частиц. Выражения (6)–(9) справедливы для случая положительных зарядов пылевых частиц. Выражение (8) для тока I_{ph} не содержит множителя, содержащего характеристики спектров излучения, что оказывается возможным в ситуации с Энцеладом для ледяных пылевых частиц, когда поверхности пылевых частиц и поверхность Энцелада имеют одинаковую работу выхода. В этой ситуации указанный множитель удастся выразить через значение N_0 . Соотношения (6)–(9) впервые использованы для описания пылевой плазмы в окрестности безатмосферных космических тел в работе [14]. Там же

обосновывается использование множителя N_0 в соотношении (8). Выражение (7) выведено специально для случая положительного заряда пылевых частиц и произвольных скоростей потоков ионов [26].

При решении уравнений (4) и (5) учитываем, что электрическое поле $\mathbf{E}$, создаваемое заряженной поверхностью Энцелада, является вертикальным (предполагается плоская поверхность без каких-либо возвышенностей или впадин), и его значение составляет

$$E(h, \theta) = \frac{2T_{e,ph}}{e} \frac{\sqrt{\cos \theta / 2}}{\lambda_D + h \sqrt{\cos \theta / 2}}. \quad (10)$$

Здесь h – высота над поверхностью Энцелада, λ_D – дебаевский радиус фотоэлектронов вблизи поверхности Энцелада. Это выражение получено в результате совместного решения кинетического уравнения для фотоэлектронов и уравнения Пуассона по аналогии с выражением, полученным для Луны [27–29]. Зависимость электрического поля от угла θ в выражении (10) обусловлена изменением числа фотонов, которые поглощаются единицей поверхности Энцелада, в зависимости от угла θ .

Представленную выше систему уравнений можно упростить. Во-первых, магнитное поле Сатурна у поверхности Энцелада примерно равно [30] 3×10^{-3} Гс, что сравнимо с магнитными полями в областях лунных магнитных аномалий [31]. Для таких магнитных полей слагаемым в правой части уравнения (4), содержащим магнитное поле, можно пренебречь по сравнению с другими слагаемыми. Система уравнений (4) и (5) (без учёта слагаемого, содержащего магнитное поле) имеет решения, характеризующие траектории пылевых частиц, в виде затухающих колебаний (см., например, [18]). Причем затухание связано с диссипативными процессами за счет процессов зарядки пылевых частиц, характеризующихся частотой (ср. [32])

$$\begin{aligned} \nu_q &\approx \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \frac{av_{T_{e,ph}}}{\lambda_D^2} \left(1 + \frac{Z_{d0} e^2}{a T_{e,ph}}\right) \times \\ &\times \exp\left(-\frac{Z_{d0} e^2}{a T_{e,ph}}\right) + \frac{1}{\sqrt{2}\pi} \frac{av_{T_{eS}}}{\lambda_{DeS}^2}, \quad (11) \end{aligned}$$

определяющей время релаксации зарядов пылевых частиц до равновесных значений (при малых отклонениях от равновесных значений). Здесь индекс “0” обозначает равновесные значения, а $v_{T_{e,ph}} = \sqrt{T_{e,ph} / m_e}$, $v_{T_{eS}} = \sqrt{T_{eS} / m_e}$, $\lambda_{DeS} = \sqrt{T_{eS} / 4\pi n_{eS} e^2}$. Для того, чтобы не слишком усложнять выражение для ν_q , при выводе (11) пренебрегали током ионов солнечного ветра (7), что оказывается возможным, поскольку для условий пылевой плазмы над поверх-

ностью Энцелада данный ток, как правило, наименьший по абсолютной величине среди токов (6)–(9).

Подход [32] позволяет получить достаточно простое условие, при котором можно рассматривать пылевые частицы над безатмосферным космическим телом как левитирующие, т.е. частицы, для которых можно предположить наличие баланса между действующими на частицу электростатическими и гравитационными силами (см., например, [18, 33, 34])

$$2/\nu_q(a) \ll T_E, \quad (12)$$

где T_E – продолжительность светлого времени суток на Энцеладе, т.е. около 0.7 земных суток ($\approx 6 \times 10^4$ с). Условие (12) означает, что колебания частицы успевают затухать гораздо быстрее, чем заканчиваются сутки на Энцеладе, т.е. можно считать пылевую частицу левитирующей большую часть времени существования пылевой плазмы над освещенной частью Энцелада. В рассматриваемых условиях неравенство (12) выполняется для подавляющего большинства пылевых частиц, способных подняться над поверхностью Энцелада.

Таким образом, для описания поведения левитирующих пылевых частиц над освещенной частью поверхности Энцелада и определения их распределений по высотам вместо системы дифференциальных уравнений (4) и (5) следует решить систему следующих алгебраических уравнений:

$$q_d \mathbf{E} + m_d \mathbf{g}_0 = 0, \quad (13)$$

$$I_e(q_d) + I_i(q_d) - I_{ph}(q_d) + I_{e,ph}(q_d) = 0. \quad (14)$$

Уравнения (13) и (14) позволяют найти зависимости $a(h)$ и $Z_d(h)$, если известна напряженность электрического поля E на высоте h . Для определения $E(h)$ необходимо решить уравнение Пуассона, в правую часть которого, наряду с другими величинами, входит концентрация пылевых частиц $n_d(h)$. Если известны функция $a(h)$ и распределение частиц реголита на поверхности Энцелада по размерам, то, учитывая тот факт, что над ней поднимаются именно пылевые частицы, находящиеся первоначально на поверхности Энцелада, можно определить распределение $n_d(h)$. Таким образом, чтобы найти зависимости $a(h)$, $Z_d(h)$, $n_d(h)$ и $E(h)$, необходимо самосогласованно решать уравнения (13) и (14), а также уравнение Пуассона, учитывающее распределение пылевых частиц по размерам на поверхности Энцелада. Поскольку последнее нам неизвестно, в качестве распределения частиц реголита по размерам на поверхности Энцелада было использовано аналогичное распределение для Луны (см., например, [18, 20]). Аналитически такое рассмотрение провести невозможно,

поэтому используются численные методы, в частности, итерационный метод. На первом этапе используется зависимость $E(h)$, определяемая (10). Соответственно, изменения электрического поля учитываются на последующих шагах.

Таким образом, на основе представленной физико-математической модели можно численными методами получить значения, характеризующие высотное распределение заряженных пылевых частиц и электрического поля над поверхностью Энцелада с учетом, в том числе, процесса эмиссии фотоэлектронов частицами пыли, присутствующими над поверхностью Энцелада. В расчетах использованы данные, характеризующие пылевые частицы и электрические поля над поверхностью Энцелада в условиях, соответствующих солнечному максимуму, работе выхода материала поверхности Энцелада $W = 8.7$ эВ, углах между местной нормалью и направлением на Солнце $\theta = 0^\circ, 77^\circ, 82^\circ$ и 87° , а также $n_{eS} = n_{iS} = 0.1 \text{ см}^{-3}$, $T_{eS} = 10$ эВ, $u_i = 400$ км/с. Соответствующие результаты расчетов показаны на рис. 2a–d, на которых a характеризует максимальный размер частиц на соответствующей высоте h , n_d – концентрация частиц пыли. Значения зарядового числа Z_d на рис. 2a–d рассчитаны для значений a , представленных на соответствующих рисунках.

Отметим, что в рамках стационарной задачи (13) и (14) решения существуют для всех перечисленных выше значений угла θ . Итак, в приповерхностном слое над освещенной частью Энцелада происходит формирование плазменно-пылевой системы. При этом, несмотря на удаленность Энцелада от Солнца, фотоэффект оказывается важным процессом при ее формировании. На основе физико-математической модели для самосогласованного описания концентраций фотоэлектронов и пылевых частиц над поверхностью освещенной части Энцелада получены функции распределения фотоэлектронов у поверхности Энцелада, а также высотные зависимости концентрации пылевых частиц, зарядов и размеров пылевых частиц, электрических полей. Показано, что над поверхностью Энцелада поднимаются пылевые частицы с характерными размерами порядка 0.2 – 0.4 мкм, превышающими характерные размеры пылевых частиц, поднимающихся над поверхностью Луны ($a \sim 0.1$ мкм [20]). У поверхности Энцелада присутствуют электрические поля с напряженностью порядка нескольких десятых В/м. Типичные концентрации пылевых частиц составляют $\sim 10^{-4} - 10^{-2} \text{ см}^{-3}$, а фотоэлектронов – порядка 1 см^{-3} . У поверхности Энцелада концентрация фотоэлектронов на порядок может превосходить кон-

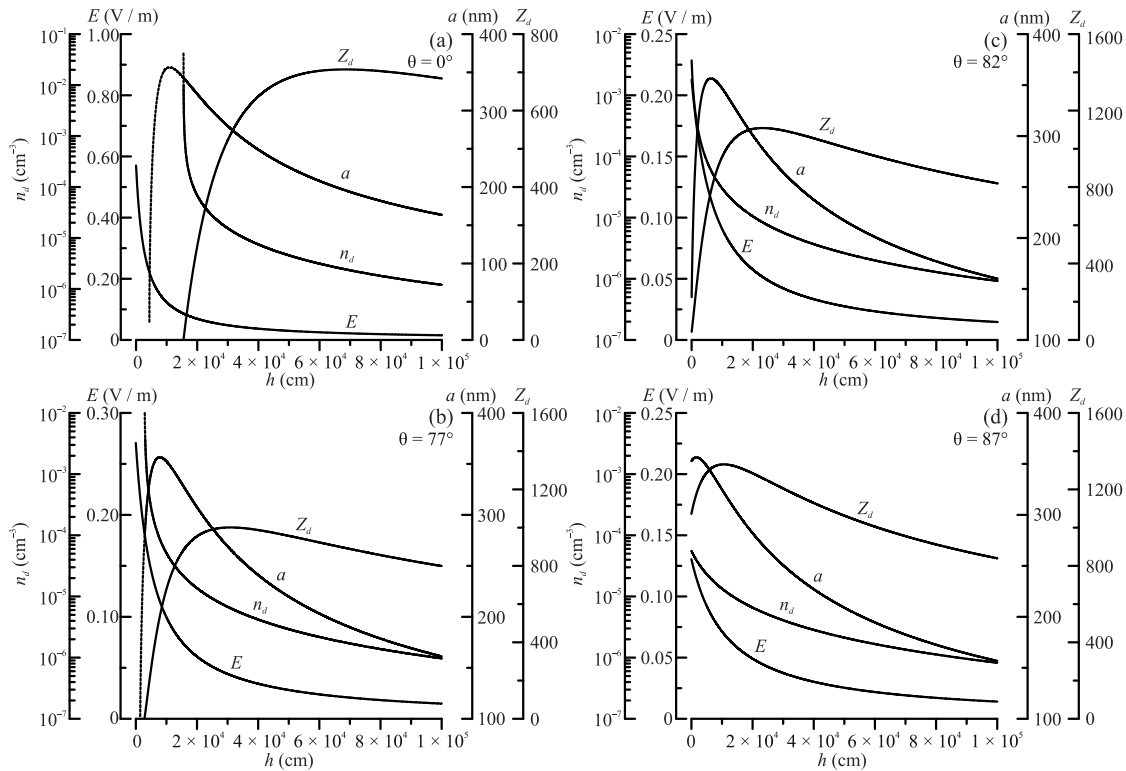


Рис. 2. Максимальные размеры a , зарядовые числа Z_d , концентрации n_d левитирующих пылевых частиц, а также электрические поля E в зависимости от высоты h над поверхностью Энцелада для углов $\theta = 0^\circ$ (а), 77° (б), 82° (с) и 87° (д). Пунктирные части кривых обозначают состояния неустойчивого равновесия левитирующих пылевых частиц

центрацию электронов и ионов солнечного ветра ($\sim 0.1 \text{ см}^{-3}$). В рамках миссии “Кассини” измерения [35] размеров пылевых частиц с помощью аппаратуры “the Cassini Radio and Plasma Wave Science” показали возможность существования, в том числе, и в окрестностях Энцелада частиц с размерами около 0.2 мкм. Однако измеренные при этом концентрации частиц были на несколько порядков ниже полученных здесь, что, в частности, обусловлено тем, что в настоящей работе представлено рассмотрение концентраций частиц на высотах вплоть до 1 км над поверхностью Энцелада, тогда как измерения “Кассини” [35] проводились на существенно больших расстояниях от Энцелада.

Таким образом, представлено описание плазменно-пылевой системы в приповерхностном слое над Энцеладом на основе самосогласованной модели. Данная модель не может использоваться для описания нестационарных процессов, возникающих, например, в области терминатора на Энцеладе. Это подразумевает необходимость дальнейшего развития модели, что предполагается осуществить в будущем. Необходимо также иметь более определенные данные о параметрах плазменно-пылевой системы в окрестности Энцелада, которые, как

надеются авторы, будут определены в результате дальнейшего анализа данных, полученных в миссии “Кассини”. Далее, по аналогии с Луной (см. [18, 36]) важным направлением исследований плазменно-пылевой системы в окрестности Энцелада является исследование влияния магнитного поля Сатурна на перенос пылевых частиц и на развитие плазменных неустойчивостей, что также предполагается рассмотреть в будущем.

Финансирование работы. Данная работа финансировалась за счет средств бюджета Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института космических исследований Российской академии наук (ИКИ РАН). Никаких дополнительных грантов на проведение или руководство данным конкретным исследованием получено не было.

Конфликт интересов. Конфликта интересов нет.

1. J. Hao, C.R. Glein, F. Huang, N. Yee, D.C. Catling, F. Postberg, J.K. Hillier, R.M. Hazen, PNAS **119**(39), e2201388119 (2022).
2. F. Spahn, J. Schmidt, N. Albers, M. Hörning, M. Makuch, M. Seiß, S. Kempf, R. Srama, V. Dikarev, S. Helfert, G. Moragas-Klostermeyer, A.V. Krivov,

- M. Sremčević, A. J. Tuzzolino, T. Economou, E. Grün, *Science* **311**(5766), 1416 (2006).
3. V. V. Yaroshenko, S. Ratynskaia, J. Olson, N. Brenning, J.-E. Wahlund, M. Morooka, W. S. Kurth, D. A. Gurnett, and G. E. Morfill, *Planet. Space Sci.* **57**, 1807 (2009).
4. M. Efroimsky, *Icarus* **300**, 223 (2018).
5. D. A. Rothery, *Satellites of the Outer Planets: Worlds in Their Own Right*, Oxford University Press, N.Y. (1999), 264 p.
6. L. Iess, D. J. Stevenson, M. Parisi, D. Hemingway, R. A. Jacobson, J. I. Lunine, F. Nimmo, J. W. Armstrong, S. W. Asmar, M. Ducci, and P. Tortora, *Science* **344**(6179), 78 (2014).
7. L. Betz, H. Braun, and C. Pulliam, *Webb Maps Surprisingly Large Plume Jetting From Saturn's Moon Enceladus* (2023), <https://www.nasa.gov/solar-system/webb-maps-surprisingly-large-plume-jetting-from-saturns-moon-enceladus/>
8. W. M. Farrell, W. S. Kurth, R. L. Tokar, J.-E. Wahlund, D. A. Gurnett, Z. Wang, R. J. MacDowall, M. W. Morooka, R. E. Johnson, and J. H. Waite Jr., *Geophys. Res. Lett.* **37**, L20202 (2010).
9. M. W. Morooka, J.-E. Wahlund, A. I. Eriksson, W. M. Farrell, D. A. Gurnett, W. S. Kurth, A. M. Persoon, M. Shafiq, M. André, and M. K. G. Holmberg, *J. Geophys. Res.* **116**, A12221 (2011).
10. I. A. D. Engelhardt, J.-E. Wahlund, D. J. Andrews, A. I. Eriksson, S. Ye, W. S. Kurth, D. A. Gurnett, M. W. Morooka, W. M. Farrell, and M. K. Dougherty, *Planet. Space Sci.* **117**, 453 (2015).
11. T. J. Stubbs, R. R. Vondrak, and W. M. Farrell, *Adv. Space Res.* **37**, 59 (2006).
12. Z. Sternovsky, P. Chamberlin, M. Horányi, S. Robertson, and X. Wang, *J. Geophys. Res.* **113**, A10104 (2008).
13. T. J. Stubbs, D. A. Glenar, W. M. Farrell, R. R. Vondrak, M. R. Collier, J. S. Halekas, and G. T. Delory, *Planet. Space Sci.* **59**, 1659 (2011).
14. А. П. Голубь, Г. Г. Дольников, А. В. Захаров, Л. М. Зеленый, Ю. Н. Извекова, С. И. Копнин, С. И. Попель, *Письма в ЖЭТФ* **95**, 198 (2012).
15. Е. А. Лисин, В. П. Тараканов, О. Ф. Петров, С. И. Попель, Г. Г. Дольников, А. В. Захаров, Л. М. Зеленый, and В. Е. Фортов, *Письма в ЖЭТФ* **98**, 755 (2013).
16. Т. М. Буринская, *Физика плазмы* **40**, 17 (2014).
17. S. I. Popel, L. M. Zelenyi, A. P. Golub', and A. Yu. Dubinskii, *Planet. Space Sci.* **156**, 71 (2018).
18. S. I. Popel, A. P. Golub', A. I. Kassem, and L. M. Zelenyi, *Phys. Plasmas* **29**, 013701 (2022).
19. C. Rossi, P. Cianfarra, F. Salvini, O. Bourgeois, and G. Tobie, *J. Geophys. Res.: Planets* **125**, e2020JE006471 (2020).
20. С. И. Попель, С. И. Копнин, А. П. Голубь, Г. Г. Дольников, А. В. Захаров, Л. М. Зеленый, Ю. Н. Извекова, *Астрономический вестник* **47**, 455 (2013).
21. E. Walbridge, *J. Geophys. Res.* **78**, 3668 (1973).
22. Б. А. Клумов, Г. Е. Морфилл, С. И. Попель, *ЖЭТФ* **127**, 171 (2005).
23. A. Schmitt-Ott, P. Schurtenberger, and H. C. Siegmann, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 1284 (1980).
24. P. C. Chamberlin, T. N. Woods, and F. G. Eparvier, *Space Weather* **6**, S05001 (2008).
25. С. И. Попель, А. П. Голубь, Ю. Н. Извекова, В. В. Афонин, Г. Г. Дольников, А. В. Захаров, Л. М. Зеленый, Е. А. Лисин, О. Ф. Петров, *Письма в ЖЭТФ* **99**, 131 (2014).
26. T. V. Losseva, S. I. Popel, A. P. Golub', Yu. N. Izvekova, and P. K. Shukla, *Phys. Plasmas* **19**, 013703 (2012).
27. Е. К. Колесников, А. С. Мануйлов, *Астрономический журнал* **59**, 996 (1982).
28. R. J. L. Grard and J. K. E. Tunaley, *J. Geophys. Res.* **76**, 2498 (1971).
29. Е. К. Колесников, А. Б. Яковлев, *Астрономический вестник* **31**, 70 (1997).
30. M. K. Dougherty, K. K. Khurana, F. M. Neubauer, C. T. Russell, J. Saur, J. S. Leisner, and M. E. Burton, *Science* **311**(5766), 1406 (2006).
31. С. И. Попель, А. П. Голубь, А. И. Кассем, Л. М. Зеленый, *Физика плазмы* **48**, 451 (2022).
32. С. И. Попель, А. П. Голубь, *Письма в ЖЭТФ* **115**, 629 (2022).
33. J. E. Colwell, S. R. Robertson, M. Horányi, X. Wang, A. Poppe, and P. Wheeler, *J. Aerosp. Eng.* **22**, 2 (2009).
34. S. K. Mishra and A. Bhardwaj, *Astrophys. J.* **884**, 5 (2019).
35. S.-Y. Ye, D. A. Gurnett, and W. S. Kurth, *Icarus* **279**, 51 (2016).
36. S. I. Popel, A. I. Kassem, Yu. N. Izvekova, and L. M. Zelenyi, *Phys. Lett. A* **384**, 126627 (2020).

Исследование нелинейности кинетической индуктивности гранулированного алюминия

М. В. Жданова¹⁾, И. Е. Пологов, Г. Ю. Свяцкий, В. И. Чичков, Н. А. Малеева

Национальный исследовательский технологический университет МИСИС, 119049 Москва, Россия

Поступила в редакцию 25 января 2024 г.

После переработки 9 февраля 2024 г.

Принята к публикации 9 февраля 2024 г.

Гранулированный алюминий – сверхпроводник, известный более восьмидесяти лет и в последнее время нашедший свое применение в области создания кубитов, сверхпроводниковых детекторов микроволнового излучения и компактных резонаторов, благодаря высоким значениям кинетической индуктивности, критических магнитных полей и тока. В данной работе продемонстрирована нелинейная зависимость индуктивности от постоянного тока, что позволяет говорить о возможности параметрического усиления микроволнового сигнала в пленках гранулированного алюминия. Набег фазы микроволнового сигнала достигал 4 радиан на частоте 7 ГГц, что позволяет оценить нелинейность системы $\Delta\phi/\phi = 1.4\%$ и потенциально возможное усиление порядка 17 дБ.

DOI: 10.31857/S1234567824060041, EDN: NZTNPR

Введение. Сверхпроводящие материалы являются одной из самых перспективных платформ для создания квантовых процессоров. На сверхпроводниковом кубите-трансмоне были основаны процессоры, позволившие впервые продемонстрировать квантовое превосходство [1, 2], реализовать поверхностные коды коррекции ошибок [3, 4] и решить первые задачи квантовой химии [5, 6]. Такие устройства нуждаются в усилителях считываемого сигнала. Лучшими с точки зрения отношения сигнала к шуму являются сверхпроводниковые параметрические усилители, которые имеют добавочный шум на уровне квантового предела (168 мК на 7 ГГц) [7].

Для широкополосного параметрического усиления применяются параметрические усилители бегущей волны, в которых в качестве нелинейной среды используется массив джозефсоновских контактов [8–10] или сверхпроводник с высокой кинетической индуктивностью, например, NbTiN [11–13], TiN [14] или NbN [15]. Изготовление джозефсоновских переходов происходит в несколько сложных технологических этапов ввиду многослойности структур. Поэтому создание топологии, состоящей из более чем 1000 таких контактов [8, 16–18] является трудоемкой задачей. Параметрические усилители бегущей волны, имеющие в своей основе пленки с нелинейной кинетической индуктивностью [19, 20], можно создать в одном технологическом цикле, что значительно сокращает производственные риски. Однако нелиней-

ное поведение таких систем сопряжено с возникновением областей локального перегрева, что приводит к снижению наблюдаемого значения криттока структуры [21, 22].

Для изготовления нелинейных криогенных микроволновых устройств может быть использован гранулированный алюминий [23, 24]. Благодаря высоким значениям кинетической индуктивности, достигающим 8 нГн на квадрат [25], данный материал привлекателен в производстве микроволновых детекторов на основе кинетической индуктивности, т.н. MKIDs [26–33], астрофизических датчиков, параметрических усилителей [11, 19], флаксоиумов – сверхпроводниковых кубитов с высокими временами когерентности [34–38], нелинейных резонаторов [39], фильтров [40] и метаматериалов [41].

В данной работе рассматривается гранулированный алюминий как альтернатива традиционному NbTiN [11–13, 19]. Высокие значения кинетической индуктивности достигаются за счет того, что зерна алюминия, разделенные оксидом, формируют трехмерную сеть джозефсоновских туннельных переходов [42]. Такая структура получается благодаря напылению алюминия в кислородосодержащей атмосфере. Дополнительными преимуществами данного материала являются температура сверхпроводящего перехода порядка 2–3 К (температура, достижимая откачиванием паров He^4 и значительно превышающая критическую температуру алюминия $T_c \approx 1.2\text{ К}$), высокие значения критического магнит-

¹⁾e-mail: zhdanova.mar@gmail.com

ного поля [43], а также простая и стабильная технология изготовления.

1. Технология изготовления. Регулируя поток кислорода при напылении гранулированного алюминия, можно управлять сопротивлением на квадрат пленок [44]. В зависимости от значения потока создаются пленки с удельным сопротивлением от 10 до 10^4 мкОм·см и температурой сверхпроводящего перехода вплоть до 3 К [44]. Образцы для данного исследования были изготовлены в чистой технологической зоне класса ISO-7 с использованием методов тонкопленочной планарной технологии. Напыление пленок выполнялось в установке электронно-лучевого напыления Plassys MEB 550 S. Топология формировалась оптической литографией с использованием фоторезиста MICROPOSIT S1805. После формирования защитной маски подложка помещалась в камеру установки Plassys MEB 550 S, где ионной пушкой стравливался гранулированный алюминий, не покрытый фоторезистом. Этапы изготовления образцов схематично представлены на рис. 1а. Финальным шагом было распиливание подложек на чипы 5×5 мм и отмывка от органических загрязнений. С помощью тестовых структур вытравленных мостиков шириной 8 мкм и длиной 200 мкм четырехзондовым методом было определено сопротивление на квадрат для каждого значения потока кислорода и построена градуировочная кривая (рис. 1б). В данной работе значение сопротивления было выбрано из соображений оптимизации фазовой скорости в передающей линии и ее характеристического импеданса и составило $R_n^{\square} \approx 200$ Ом, соответствующее значению 1.6 sccm (стандартных кубических см/мин) потока O_2 .

2. Исследование нелинейных свойств пленок гранулированного алюминия. В тонких сверхпроводящих пленках гранулированного алюминия кинетическая индуктивность L_k преобладает над геометрической L_g . В связи с высоким сопротивлением R кинетическая индуктивность может на несколько порядков превышать геометрическую [45]. Кинетическая индуктивность сверхпроводника может быть найдена в рамках теории Бардина–Купера–Шриффера (БКШ). В пределе низких частот ($\hbar\omega \ll k_B T_c$) в соответствии с теорией Маттиса–Бардина для грязного сверхпроводника отношение мнимой проводимости σ_2 к нормальной σ_n имеет следующий вид:

$$\frac{\sigma_2}{\sigma_n} = \frac{\pi\Delta}{\hbar f} \tanh \frac{\Delta}{2k_B T}, \quad (1)$$

где Δ – энергетическая щель сверхпроводника, зависящая в общем случае от температуры и тока

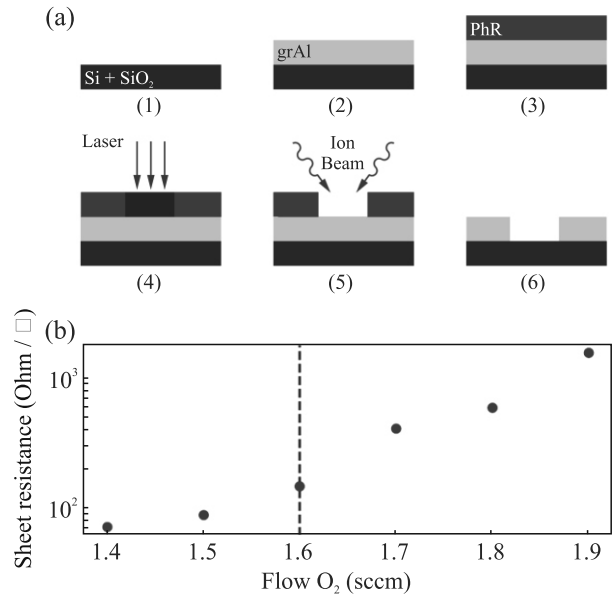


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Этапы изготовления образца: на подложку оксидированного кремния (1) электронно-лучевым напылением осаждается пленка гранулированного алюминия (2), далее наносится центрифугированием фоторезист (3), в процессе оптической литографии (4) формируется защитная маска, после чего травлением ионной пушкой (5) создается топология поверхности (6). (б) – Градуировочная кривая: график зависимости значения сопротивления на квадрат пленок гранулированного алюминия от потока кислорода во время напыления алюминия. Вертикальной линией обозначен образец с сопротивлением 200 Ом/□, рассматриваемый в данной работе

смещения. Введя кинетическую индуктивность как $L_k = 1/2\pi f\sigma_2$, запишем ее для полоски сверхпроводника длиной l и шириной w

$$L_k = N \frac{\hbar R_n^{\square}}{\pi\Delta} \frac{1}{\tanh \frac{\Delta}{2k_B T}}, \quad (2)$$

где $N = l/w$ – число квадратов в полоске, а $R_n^{\square}$ – ее нормальное сопротивление на квадрат. При температурах существенно ниже критической, воспользовавшись выражением БКШ для энергетической щели сверхпроводника $\Delta = 1.76\pi k_B T_c$, получим привычное выражение [39]

$$L_k = 0.18N \frac{\hbar R_n^{\square}}{k_B T_c}. \quad (3)$$

Рассмотрим теперь зависимость кинетической индуктивности от тока смещения при низких температурах, используя метод, изложенный в [46]. При температурах существенно ниже критической

$$L_k(I) = L_k(0)e^{-\pi\zeta/4}, \quad (4)$$

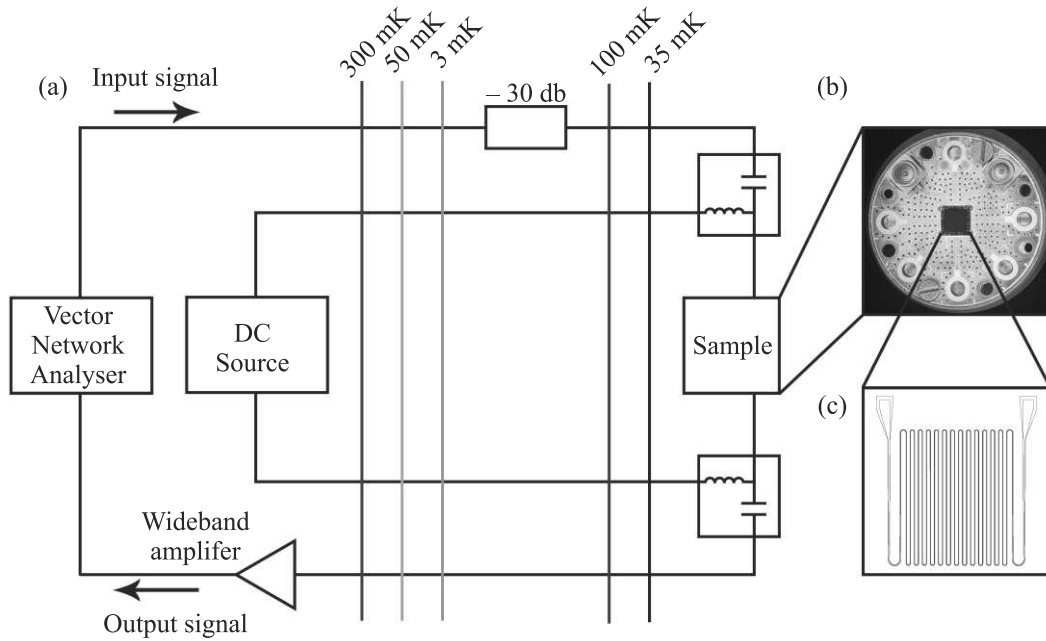


Рис. 2. (Цветной онлайн) (a) – Схема экспериментальной установки. Образец (c) устанавливался в медный держатель (b), который монтировался к нижней ступени криостата растворения. Через образец пропусклся микроволновой сигнал и измерялся коэффициент передачи. Через инжекторы постоянного тока в систему подавался ток смещения. Входящий сигнал ослаблен аттенуатором 30 дБ, выходящий сигнал усилен коммерческим широкополосным усилителем

где $L_k(0)$ задается уравнением (3), а через $\zeta = \frac{Dk^2}{2\Delta(I)}$ обозначена комбинация коэффициента диффузии D , градиента фазы по длине полоски k и энергетической щели $\Delta(I)$, соответствующей току смещения I . Для каждого значения тока смещения величина ζ может быть найдена решением уравнения

$$\frac{I}{I_{\text{dep}}} = 1.897e^{-3\pi\zeta/8} \sqrt{\zeta} \left(\frac{\pi}{2} - \frac{2}{3}\zeta \right), \quad (5)$$

где I_{dep} – ток распаривания, полученный исходя из БКШ. Выражения (4) и (5) получены решением уравнения Горькова в пределе грязного сверхпроводника [47]. С другой стороны, кинетическая индуктивность в самом общем случае нелинейно зависит от амплитуды приложенного тока из-за разрушения куперовских пар (увеличения концентрации квази-частиц) и может быть оценена, исходя из уравнения Пишпарда, как

$$L_k(I) = L_k(0) \left(1 + \frac{I^2}{2I_*^2} + \dots \right), \quad (6)$$

где $L_k(0)$ задается уравнением (3), а I_* – величина порядка критического тока [11, 46]. Данная оценка получается при температурах, существенно ниже критической, с учетом того, что из соображений симметрии из разложения исключаются нечетные члены.

Сверхпроводящая передающая линия на основе тонких пленок из гранулированного алюминия позволяет использовать нелинейность кинетической индуктивности для создания параметрического взаимодействия сигналов. Для исследования нелинейных свойств пленок гранулированного алюминия на подложке из оксидированного кремния была изготовлена копланарная передающая линия длиной 78 мм с шириной центральной полоски и зазором 3.5 и 5 мкм соответственно (рис. 2c). В работе использовалась пленка толщиной $t = 30$ нм с сопротивлением на квадрат в нормальном состоянии $R_n^{\square} = 200$ Ом и критической температурой сверхпроводящего перехода $T_c = 2.15$ К. Относительная диэлектрическая проницаемость кремниевой подложки $\epsilon_r = 11.9$. Вход и выход передающей линии соединялись с контактными площадками через преобразователи импеданса. Характеристический импеданс копланарной передающей линии:

$$Z = \sqrt{(L_{kl} + L_{gl})/C_1}, \quad (7)$$

где L_{kl} и L_{gl} – погонные геометрическая и кинетическая индуктивность линии, а C_1 – погонная емкость.

Фазовая скорость волны в передающей линии:

$$V_{ph} = \frac{1}{\sqrt{(L_{kl} + L_{gl})C_1}}. \quad (8)$$

В соответствии со схемой экспериментальной установки (рис. 2а) были проведены измерения транспортных свойств полученных образцов длинных передающих линий из гранулированного алюминия в криостате растворения Oxford Instruments Triton DR200 при температуре 35 мК. Образец (рис. 2с) помещался в медный держатель (рис. 2б), где соединялся с подводящими линиями с помощью алюминиевых нитей диаметром 25 мкм. Далее держатель крепился к нижней ступени криостата. Генератором сигнала выступал векторный анализатор цепей Agilent Technologies PNA-X N5242A. На входе в криостат сигнал ослаблялся аттенуаторами для подавления тепловых шумов. Для исследования нелинейных свойств через инжекторы постоянного тока Mini-Circuits Bias-Tee ZX85-12G-S+ на вход в образец подавался ток смещения от источника Keithley 6221.

3. Результаты и обсуждение. Для демонстрации нелинейных свойств сверхпроводящих пленок была измерена фаза микроволнового сигнала в зависимости от величины тока смещения. Нелинейный набег фазы пропорционален полной фазовой длине линии передачи при малом сигнале [48]:

$$\phi(I) = 2\pi fl/V_{ph}(I). \quad (9)$$

В пределе высокой кинетической индуктивности $L_{gl} \ll L_k$ из формул (8) и (9) можно получить токовую зависимость кинетической индуктивности $L_k(I)$, зная токовую зависимость разности фаз $\Delta\phi(I)$:

$$L_k(I) = \left(\sqrt{L_k(0)} + \frac{\Delta\phi(I)}{2\pi fl\sqrt{C_1}} \right)^2, \quad (10)$$

где $L_k(0) \approx 3.63$ Гн/м – погонная кинетическая индуктивность при малом сигнале, которая определяется по формуле (3), l – полная физическая длина передающей линии, $C_1 = 1.25 \times 10^{-10}$ Ф/м – погонная емкость.

На рисунке 3 показаны результаты исследования нелинейности кинетической индуктивности. Красными точками (рис. 3а) изображена зависимость набег фазы микроволнового сигнала от тока на частоте 7 ГГц. При токе 80 мкА достигается максимальный набег фазы $\Delta\phi = 4$ радиан при полной фазовой длине 284 радиан. Это дает нелинейность $\Delta\phi/\phi$ около 1.4%, что соизмеримо со значениями, продемонстрированными ранее на пленках NbTiN [11, 48]. На рисунке 3б красными точками показана кинетическая индуктивность, пересчитанная из экспериментальных данных фазы по формуле (10).

Используя приближение (6), построена аналитическая зависимость для исследуемого образца: синяя

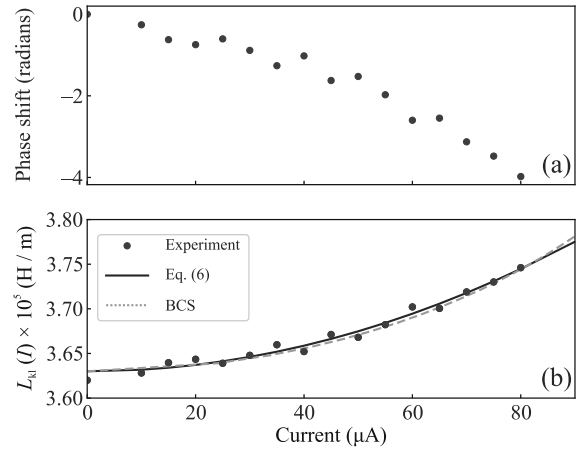


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость измеренного набег фазы $\Delta\phi$ микроволнового сигнала (а) и кинетической индуктивности (б) от постоянного тока на частоте микроволнового сигнала 7 ГГц. На данной частоте максимальный набег фазы составил 4 радиан, при полной фазовой длине $\phi = 284$ радиан. Экспериментально полученные значения кинетической индуктивности (красные точки) хорошо согласуются с двумя аналитическими кривыми: приближение БКШ из уравнений (4) и (5) – оранжевая пунктирная линия; и приближение уравнения (6) – синяя сплошная линия

линия на рис. 3б, где $I_* \approx 318$ мкА. На этом же рисунке показана зависимость кинетической индуктивности от тока согласно уравнениям (4) и (5) (пунктирная оранжевая линия), согласно которой ток распаривания получился $I_{dep} \approx 144$ мкА. Экспериментально полученные значения кинетической индуктивности хорошо согласуются с аналитическими кривыми. Экспериментально полученный критический ток исследуемого образца $I_c \approx 80$ мкА, составляет 56% от теоретического предела. Экспериментальное значение критического тока может быть понижено из-за дефектов и неоптимальной геометрии структуры.

Для простой длинной передающей линии со слабой дисперсией в общем случае усиление G можно оценить по формуле [11]:

$$G \approx 1 + (\Delta\phi)^2. \quad (11)$$

В эксперименте набег фазы достигался путем пропускания постоянного тока через линию передачи, что происходит и при прохождении микроволнового сигнала большей мощности. По формуле (11) можно оценить, что в бездисперсионной передающей линии можно достичь усиления микроволнового сигнала порядка 17 дБ на частоте 7 ГГц.

В заключение, нами была экспериментально продемонстрирована нелинейная зависимость кинетической индуктивности тонкой пленки гранулированно-

го алюминия от постоянного тока, что, насколько известно авторам, ранее не исследовалось. На линии фазовой длиной 284 радиана получен набег фазы в 4 радиана на частоте 7 ГГц. Подобное значение позволяет ожидать существенное усиление микроволнового сигнала, открывая возможность создания параметрических усилителей на основе гранулированного алюминия.

Авторы выражают благодарность В. В. Рязанову, А. В. Карпову и А. В. Устинову за поддержку данного исследования и ценные рекомендации в процессе работы над ним.

Финансирование работы. Исследование нелинейности кинетической индуктивности гранулированного алюминия выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект # 21-72-30026, <https://rscf.ru/en/project/21-72-30026/>). Обзор исследований материалов с высокой кинетической индуктивностью и реализаций параметрических усилителей бегущей волны выполнен при финансовой поддержке Программы стратегического академического лидерства “Приоритет-2030” (грант НИТУ МИСИС К2-2022-029).

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

1. J. D. Franson, M. M. Donegan, M. J. Fitch, B. C. Jacobs, and T. B. Pittman, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 137901 (2002).
2. F. Arute, A. Kunal, R. Babbush et al. (Collaboration), *Nature* **574**, 505 (2019).
3. R. Acharya, I. Aleiner, R. Allen et al. (Collaboration), *Nature* **614**, 676 (2023).
4. S. Krinner, N. Lacroix, A. Remm, et al. (Collaboration), *Nature* **605**, 669 (2022).
5. F. Arute, K. Arya, A. Remm et al. (Collaboration), *Science* **369**, 1084 (2020).
6. A. Kandala, A. Mezzacapo, K. Temme, M. Takita, M. Brink, J. M. Chow, and J. M. Gambetta, *Nature* **549**, 242 (2017).
7. A. Roy and M. Devoret, *Comptes Rendus Physique* **17**, (2016).
8. C. Macklin, K. O’Brien, D. Hover, M. E. Schwartz, V. Bolkhovskiy, X. Zhang, W. D. Oliver, and I. Siddiqi, *Science* **350**, 307 (2015).
9. M. A. Castellanos-Beltran and K. W. Lehnert, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 083509 (2007).
10. M. A. Castellanos-Beltran, K. D. Irwin, G. C. Hilton, L. R. Vale, and K. W. Lehnert, *Nature Phys.* **4**, 929 (2008).
11. B. H. Eom, P. K. Day, H. G. LeDuc, and J. Zmuidzinas, *Nature Phys.* **8**, 623 (2012).
12. M. Malnou, M. R. Vissers, J. D. Wheeler, J. Aumentado, J. Hubmayr, J. N. Ullom, and J. Gao, *PRX Quantum* **2**, 010302 (2021).
13. S. Chaudhuri, D. Li, K. D. Irwin, C. Bockstiegel, J. Hubmayr, J. N. Ullom, M. R. Vissers, and J. Gao, *Appl. Phys. Lett.* **110**, 152601 (2017).
14. H. G. Leduc, B. Bumble, P. K. Day, B. H. Eom, J. Gao, S. Golwala, B. A. Mazin, S. McHugh, A. Merrill, D. C. Moore, O. Noroozian, A. D. Turner, and J. Zmuidzinas, *Appl. Phys. Lett.* **97**, 102509 (2010).
15. S. Zhao, S. Withington, and C. N. Thomas, *Supercond. Sci. Technol.* **36**, 105010 (2023).
16. A. B. Zorin, M. Khabipov, J. Dietel, and R. Dolata, *16th International Superconductive Electronics Conference (ISEC)*, IEEE, Naples, Italy (2017).
17. L. Planat, A. Ranadive, R. Dassonneville, J. Puertas Mart’inez, S. Léger, C. Naud, O. Buisson, W. Hasch-Guichard, D. M. Basko, and N. Roch, *Phys. Rev. X* **10**, 021021 (2020).
18. A. Ranadive, M. Esposito, L. Planat, E. Bonet, C. Naud, O. Buisson, W. Guichard, and N. Roch, *Nat. Commun.* **13**, 1737 (2022).
19. M. R. Vissers, R. P. Erickson, H.-S. Ku, Leila Vale, Xian Wu, G. C. Hilton, and D. P. Pappas, *Appl. Phys. Lett.* **108**, 012601 (2016).
20. S. Shu, N. Klimovich, B. H. Eom, A. D. Beyer, R. B. Thakur, H. G. Leduc, and P. K. Day, *Phys. Rev. Res.* **3**, 023184 (2021).
21. W. J. Skocpol, M. R. Beasley, and M. Tinkham, *J. Appl. Phys.* **45**, 4054 (1974).
22. C. Kurter, A. Zhuravel, A. V. Ustinov, and S. M. Anlage, *Phys. Rev. B* **84**, 104515 (2011).
23. R. W. Cohen and B. Abeles, *Phys. Rev.* **168**, 444 (1968).
24. G. Deutscher, H. Fenichel, M. Gershenson, E. Grünbaum, and Z. Ovadyahu, *J. Low Temp. Phys.* **10**, 231 (1973).
25. L. Grünhaupt, N. Maleeva, S. T. Skacel, M. Calvo, F. Levy-Bertrand, A. V. Ustinov, H. Rotzinger, A. Monfardini, G. Catelani, and I. M. Pop, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 117001 (2018).
26. P. K. Day, H. G. LeDuc, B. A. Mazin, A. Vayonakis, and J. Zmuidzinas, *Nature* **425**, 817 (2003).
27. O. Quaranta, T. W. Cecil, L. Gades, B. Mazin, and A. Miceli, *Supercond. Sci. Technol.* **26**, 105021 (2013).
28. P. Szypryt, B. A. Mazin, B. Bumble, H. G. Leduc, and L. Baker, *Appl. Superconduct.* **25**, 1 (2015).
29. E. S. Battistelli, F. Bellini, C. Bucci et al. (Collaboration), *Eur. Phys. J. C* **75**, 353 (2015).
30. L. Cardani, I. Colantoni, A. Cruciani, S. Di Domizio, M. Vignati, F. Bellini, N. Casali, M. G. Castellano, A. Coppolecchia, C. Cosmelli, and C. Tomei, *Appl. Phys. Lett.* **107**, 093508 (2015).
31. L. Cardani, N. Casali, I. Colantoni, A. Cruciani, F. Bellini, M. G. Castellano, C. Cosmelli,

- A. D'Addabbo, S. Di Domizio, M. Martinez, C. Tomei, and M. Vignati, *Appl. Phys. Lett.* **110**, 033504 (2017).
32. F. Valenti, F. Henriques, G. Catelani et al. (Collaboration). *Phys. Rev. Appl.* **11**, 054087 (2019).
33. F. Levy-Bertrand, A. Benoît, O. Bourrion, M. Calvo, A. Catalano, J. Goupy, F. Valenti, N. Maleeva, L. Grünhaupt, I. M. Pop, and A. Monfardini, *Phys. Rev. Appl.* **15**, 044002 (2021).
34. V. E. Manucharyan, J. Koch, L. I. Glazman, and M. H. Devoret, *Science* **326**, 113 (2009).
35. I. M. Pop, K. Geerlings, G. Catelani, R. J. Schoelkopf, L. I. Glazman, and M. H. Devoret, *Nature* **508**, 369 (2014).
36. Y. Lin, L. B. Nguyen, N. Grabon, J. S. Miguel, N. Pankratova, and V. E. Manucharyan, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 150503 (2018).
37. N. Earnest, S. Chakram, Y. Lu, N. Irons, R. K. Naik, N. Leung, L. Ocola, D. A. Czaplewski, B. Baker, J. Lawrence, J. Koch, and D. I. Schuster, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 150504 (2018).
38. J. Cohen, W. C. Smith, M. H. Devoret, and M. Mirrahimi, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 060503 (2017).
39. H. Rotzinger, S. T. Skacel, M. Pfirrmann, J. N. Voss, J. Münzberg, S. Probst, P. Bushev, M. P. Weides, A. V. Ustinov, and J. E. Mooij, *Supercond. Sci. Technol.* **30**, 025002 (2016).
40. K. D. Irwin, M. D. Niemack, J. Beyer, H. M. Cho, W. B. Doriese, G. C. Hilton, C. D. Reintsema, D. R. Schmidt, J. N. Ullom, and L. R. Vale, *Supercond. Sci. Technol.* **23**, 034004 (2010).
41. C. Kurter, J. Abrahams, and S. M. Anlage, *Appl. Phys. Lett.* **96**, 253504 (2010).
42. N. Maleeva, L. Grünhaupt, T. Klein, F. Levy-Bertrand, O. Dupre, M. Calvo, F. Valenti, P. Winkel, F. Friedrich, W. Wernsdorfer, A. V. Ustinov, H. Rotzinger, A. Monfardini, M. V. Fistul, and I. M. Pop, *Nat. Commun.* **9**, 3889 (2018).
43. K. Borisov, D. Rieger, P. Winkel, F. Henriques, F. Valenti, A. Ionita, M. Wessbecher, M. Spiecker, D. Gusenkova, I. M. Pop, and W. Wernsdorfer, *Appl. Phys. Lett.* **117**, 120502 (2020).
44. U. S. Pracht, N. Bachar, L. Benfatto, G. Deutscher, E. Farber, M. Dressel, and M. Scheffler, *Phys. Rev.* **93**, 100503 (2016).
45. D. C. Mattis and J. Bardeen, *Phys. Rev.* **111**, 412 (1958).
46. A. J. Annunziata, D. F. Santavicca, L. Frunzio, G. Catelani, M. J. Rooks, A. F. and D. E. Prober, *Nanotechnology* **21**, 445202 (2010).
47. K. Maki, *Prog. Theor. Exp. Phys.* **31**, 29 (1964).
48. A. A. Adamyan, S. E. de Graaf, S. E. Kubatkin, and A. V. Danilov, *J. Appl. Phys.* **119**, 083901 (2016).

Особенности низкотемпературной волны зарядовой плотности в моноклинной фазе NbS_3 , проявляющиеся в ЯМР и в транспортных свойствах

А. С. Семакин⁺, И. Р. Мухамедшин*, С. Г. Зыбцев[×], В. Я. Покровский^{×1)}

⁺ Wihuri Physical Laboratory, Department of Physics and Astronomy, University of Turku, 20014 Turku, Finland

* Université Paris-Saclay, CNRS, Laboratoire de Physique des Solides, 91405 Orsay, France

[×] Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН, 125009 Москва, Россия

Поступила в редакцию 9 февраля 2024 г.

После переработки 9 февраля 2024 г.

Принята к публикации 15 февраля 2024 г.

Методом ядерного магнитного резонанса ^{93}Nb исследована релаксация поперечной ядерной намагниченности моноклинной фазы NbS_3 в области температуры $T_{P2} = 150$ К, при которой образуется низкотемпературная волна зарядовой плотности. Показано, что несколько ниже T_{P2} происходит критическое замедление одной из мод колебаний решетки, достаточно медленной даже выше T_{P2} . При этом переход при T_{P2} происходит не только в низкоомных образцах, как считалось ранее, но и в высокоомных, и затрагивает атомы Nb в объеме образца. Транспортные свойства высокоомных образцов, а именно, размытие порога депиннинга волны зарядовой плотности ниже T_{P2} , подтверждают, что при T_{P2} в них происходит фазовый переход. Сделан вывод, что искажение решетки при T_{P2} не определяется пайерлсовским механизмом и может быть связано с переходом Келдыша–Копаева. Другая возможность – возникновение выше T_{P2} флуктуационного искажения решетки, препятствующего скольжению волны зарядовой плотности.

DOI: 10.31857/S1234567824060053, EDN: ORYRXH

Моноклинная фаза NbS_3 (NbS_3 -II) примечательна существованием в ней двух волн зарядовой плотности (ВЗП) при комнатной температуре – ВЗП-0 и ВЗП-1, а также третьей ВЗП, ВЗП-2, формирующейся при 150 К (работа [1] и ссылки в ней). Многообразие волн зарядовой плотности в NbS_3 -II, очевидно, связано со сложной структурой элементарной ячейки. В сечении (010), параллельном осям **a** и **c**, элементарную ячейку этого политипа пересекает 8 цепочек атомов Nb, окруженных тригональными призмами из атомов S. При этом, как следует из структурных данных [2], площадь элементарной ячейки s_0 в сечении (010) равна $180 \text{ \AA}^2$. Установлены температуры формирования волн зарядовой плотности: $T_{P0} \approx 470$ К (ВЗП-0) и $T_{P1} \approx 360$ К (ВЗП-1), а также – соответствующие волновые векторы: $\mathbf{q}_0 = (0, 0.352, 0)$ и $\mathbf{q}_1 = (0, 0.298, 0)$ [2–4].

ВЗП-2 образуется при $T_{P2} = 150$ К. В транспортных свойствах ВЗП-2 проявляется не во всех образцах, а только в низкоомных, с удельной проводимостью $\sigma_s(300 \text{ К})$ в диапазоне $10 - (3 \times 10^2) (\text{Ом} \cdot \text{см})^{-1}$ [1]. Формирование “низкотемпературной” ВЗП-2 вид-

но по ступеньке удельной проводимости $\delta\sigma_{s2}$ вблизи T_{P2} . Ниже T_{P2} наблюдается нелинейная проводимость, связанная со скольжением ВЗП-2. В этом смысле переход при T_{P2} аналогичен переходам, наблюдаемым при T_{P1} и T_{P0} , однако искажения решетки ниже T_{P2} до сих пор наблюдать не удалось.

Особенность в области T_{P2} наблюдалась и при исследовании термо-ЭДС [5]. Если высокоомные образцы ниже T_{P1} проявляют свойства собственных полупроводников, низкоомные подобны легированным полупроводникам, в которых электроны, перешедшие с примесей (дефектов, вакансий) в зону проводимости, конденсируются в ВЗП-2 [5]. Соответственно, плотность заряда, переносимого ВЗП-2, меняется от образца к образцу. Зная отношение плотности тока ВЗП к фундаментальной частоте скольжения ВЗП, j_{CDW}/f [1], можно найти число цепочек в элементарной ячейке, дающих вклад в ток ВЗП: $N_{\text{ch}} \equiv s_0 j_{\text{CDW}}/(2ef)$. Если для ВЗП-1 и ВЗП-0 соответствующие значения N_{ch} порядка 1 [1, 3], что представляется разумным, для ВЗП-2 N_{ch} варьируется в диапазоне $1/3 - 10^{-3}$ [1], т.е., во всех случаях на элементарную ячейку приходится менее одной цепочки. Сравнение образцов с разной удельной проводимостью

¹⁾ e-mail: vadim.pokrovskiy@mail.ru

стью привело нас к выводу, что N_{ch} оказывается пропорциональной скачку $\delta\sigma_{s2}$ [1]. Также установлено, что в низкоомных образцах наблюдается дефицит серы [1].

В числе аномальных свойств ВЗП-2 отметим также ее фотопроводимость. В отличие от волн зарядовой плотности в некоторых других материалах, а также от ВЗП-1 в NbS_3 -II, при воздействии излучения ближнего ИК диапазона наблюдается не повышение, а понижение порогового поля, $E = E_t$, депининга этой ВЗП [6].

Особенность вискероов NbS_3 – большое количество дефектов упаковки (ДУ). О ДУ в фазе I сообщалось в [7]. В фазе II ДУ наблюдались в сканирующий туннельный микроскоп (СТМ) и просвечивающий электронный микроскоп (ПЭМ) [4, 8, 9] в плоскости (100) в виде атомных рядов, параллельных оси **b**. Эти ряды отличаются, как правило, лишним периодом в направлении оси **c** [9]. Был сделан вывод, что ДУ представляют собой плоскости, параллельные (001), т.е. перпендикулярные направлению оси **c**, вдоль которой связь наиболее слабая [8]. В некоторых случаях на изображениях, полученных в СТМ ниже 150 К, в области ДУ наблюдалась модуляция структуры с периодом около 2.1 b [9]. Высказано предположение, что это и есть ВЗП-2, однако проследить изменение структуры одного и того же участка ДУ при понижении температуры ниже T_{P2} не удалось.

В результате сложилась следующая гипотетическая картина: ВЗП-2 формируется на ДУ, на которых, по-видимому, собираются вакансии серы [4, 9]. Чем больше вакансий, тем выше концентрация дефектов и, соответственно, плотность заряда ВЗП-2 [1]. Таким образом, ВЗП-2 состоит из плоскостей атомной толщины, расположенных в объеме кристалла, т.е. представляет собой набор 2D слоев. Недавнее наблюдение ВЗП на монослоях дихалькогенидов [10–12] добавило правдоподобности этой картине.

Переходы при T_{P1} и T_{P2} удалось также наблюдать с применением методики ЯМР [1]. Спектры ЯМР ^{93}Nb измерялись в неориентированной “вате”, состоящей из высокоомных и низкоомных вискероов. Переход при T_{P1} четко виден по изменению величины найтовского сдвига центральной линии ЯМР на 0.05 % вблизи 360 К, что свидетельствует об изменении концентрации носителей на цепочках. В области же T_{P2} сдвига линий ЯМР не наблюдалось, однако несколько ниже перехода, вблизи 130 К, наблюдался максимум скорости релаксации поперечной ядерной намагниченности, T_2^{-1} . Особенность была объяснена замораживанием одной из фононных мод, приво-

дящим к возникновению периодического искажения электронной плотности при охлаждении. Этот вывод подтверждается тем, что аналогичный максимум наблюдался в NbSe_3 , также чуть ниже температуры формирования одной из волн зарядовой плотности (ВЗП-1) [13]. В то же время, в отличие от NbS_3 -II [1], в NbSe_3 при этой же температуре наблюдался еще и максимум скорости релаксации *продольной* ядерной намагниченности, T_1^{-1} .

Поскольку исследованный в работе [1] образец представлял смесь высокоомных и низкоомных вискероов, у нас не было возможности определить, в каком типе образцов происходит вымерзание фононной моды. Кроме того, измерения ЯМР в неориентированных образцах не позволили определить, какие именно из неэквивалентных цепочек в NbS_3 -II затрагивает переход при T_{P2} .

В данной работе методом ЯМР исследованы образцы, набранные из вискероов, ориентированных вдоль оси **b**. Приготовлены два образца: преимущественно высокоомные и преимущественно низкоомные. На обоих образцах переход в области T_{P2} четко виден по максимуму на температурной зависимости скорости релаксации поперечной ядерной намагниченности ^{93}Nb , $T_2^{-1}(T)$. При этом в переходе участвуют атомы Nb во всех элементарных ячейках NbS_3 -II, а не только на ДУ. Результат объясняется в предположении, что ВЗП-2 существует и выше 150 К, однако находится в состоянии движения, связанного с одномерными флуктуациями. Результат подтверждается данными экспериментальных исследований транспортных свойств высокоомных образцов NbS_3 -II.

Развивая методику, примененную в [1], мы приготовили для измерений наборы ориентированных вискероов NbS_3 -II из двух разных ростовых партий, – с преобладанием низкоомных (образец P2a) и высокоомных кристаллов (образец P2b). Отобранные вискероы были аккуратно уложены параллельно друг другу на клейкой ленте (см. вставку к рис. 1с). Затем эта лента нарезалась на полоски шириной 3 мм, которые складывались в стопку, так чтобы оси **b** вискероов были параллельны. Это позволило проводить измерения как в ориентации магнитного поля **H** вдоль кристаллографической оси **b** вискероов (**H**||**b**), так и в перпендикулярной ориентации (**H** ⊥ **b**). Масса вискероов в получившихся образцах была немного меньше 30 мг. При проведении исследований использовался сверхпроводящий соленоид с постоянным магнитным полем величиной $B = 7.5535 \text{ Тл}$ и однородностью поля лучше, чем 10 ppm в объеме исследованных образцов (их размеры примерно $20 \times 3 \times 3 \text{ мм}^3$).

При измерениях спектров ЯМР использовалась стандартная двухимпульсная последовательность радиочастотных импульсов, с помощью которой в области центральной линии ЯМР ^{93}Nb измерялись сигналы спинового эхо с шагом по частоте в 100 кГц, а затем спектр ЯМР реконструировался с помощью преобразования Фурье [14].

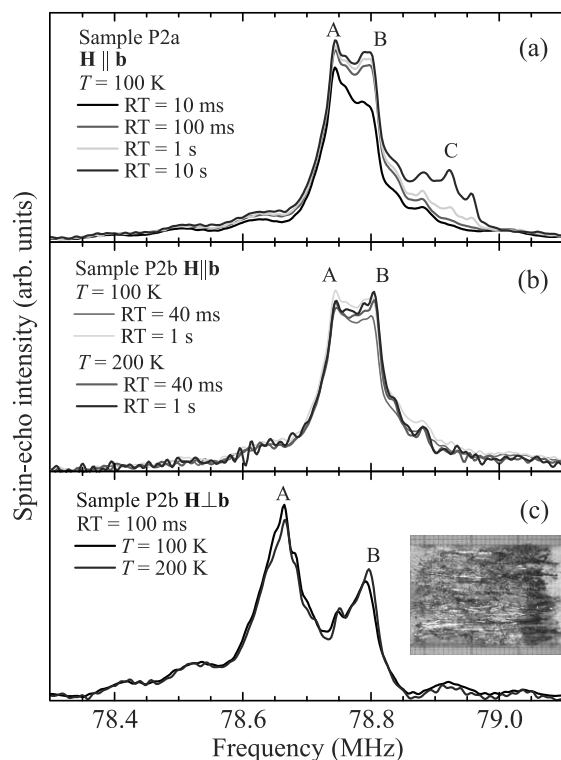


Рис. 1. (Цветной онлайн) Спектры центральной линии ЯМР ^{93}Nb в образцах P2a (низкоомные висеры) и P2b (высокоомные висеры) при $T = 100$ и 200 K, различном времени повторения импульсной последовательности RT, различной ориентации магнитного поля $\mathbf{H} \parallel \mathbf{b}$ и $\mathbf{H} \perp \mathbf{b}$

На рисунке 1а приведены спектры центральной линии ЯМР ^{93}Nb , соответствующей переходу $-1/2 \rightarrow +1/2$, для образца P2a при температуре 100 K. В данном образце преобладают низкоомные висеры. Измерения проводились при различном периоде повторения импульсной последовательности RT (repetition time). В спектрах можно выделить три неэквивалентные группы линий, которые обозначены на рис. 1а как А, В и С. Интенсивность линии А практически не зависит от времени RT, а линии В – немного уменьшается с уменьшением RT. Тем не менее, времена релаксации спинов на ядрах ^{93}Nb , соответствующих обеим линиям, можно считать малыми, если сравнивать с группой ли-

ний С: она практически полностью подавляется с уменьшением RT (рис. 1а).

Ядерная релаксация обусловлена флуктуирующими полями на ядрах ^{93}Nb , источником которых в соединении NbS_3 являются носители заряда. Поэтому сигналы ЯМР линий А и В соответствуют наиболее проводящим цепочкам в образце, в то время как атомы ^{93}Nb , ответственные за линию С, находятся в непроводящих областях, которыми, возможно, являются непроводящие цепочки.

На рисунке 1b, с приведены спектры центральной линии ЯМР ^{93}Nb в образце P2b, в котором преобладают высокоомные висеры, при температурах 100 и 200 K. Представлены результаты измерений в ориентации $\mathbf{H}$ как вдоль оси висеров $\mathbf{H} \parallel \mathbf{b}$ – рис. 1b, так и перпендикулярно ей ($\mathbf{H} \perp \mathbf{b}$) – рис. 1c. Сравнивая рис. 1а и b, мы видим, что, в отличие от образца P2a, в спектрах образца P2b практически отсутствует линия С. Такое качественное отличие спектров наблюдалось во всем температурном диапазоне исследований – от 5 до 400 K. Это указывает на то, что сигналы ЯМР группы линий С происходят от дефектных областей и не принадлежат собственно фазе $\text{NbS}_3\text{-II}$.

Отметим изменение вида спектра при изменении ориентации висеров относительно направления $\mathbf{H}$ (рис. 1b и c), что отражает квазиодномерный характер структуры NbS_3 [15, 16].

Если сравнить спектры ЯМР при температурах 100 и 200 K на рис. 1, хорошо видно, что они практически идентичны. Это указывает на то, что в области $T_{P2} = 150$ K не происходит перестройки электронного окружения ядер ^{93}Nb , а, значит, при этом переходе не происходит перестройки зарядового и спинового состояния цепочек.

Наиболее существенный прогресс в понимании перехода при T_{P2} был достигнут нами при исследовании температурной зависимости скорости релаксации поперечной ядерной намагниченности $T_2^{-1}(T)$. Были измерены величины T_2^{-1} на центральных линиях ЯМР в образцах P2a и P2b в диапазоне температур 100–200 K. В ориентации магнитного поля $\mathbf{H} \perp \mathbf{b}$ удалось измерить величины T_2^{-1} отдельно на линиях А и В, а в ориентации $\mathbf{H} \parallel \mathbf{b}$ – усредненную величину T_2^{-1} . Времена релаксации поперечной ядерной намагниченности измерялись на резонансной частоте с применением стандартной двухимпульсной методики: регистрировалась интенсивность спинового эхо в зависимости от времени задержки τ между первым и вторым радиочастотными импульсами. Кривые спада поперечной компоненты намагниченности $M(\tau)$ аппроксимировались как $M(0) \exp(-2\tau/T_2)$.

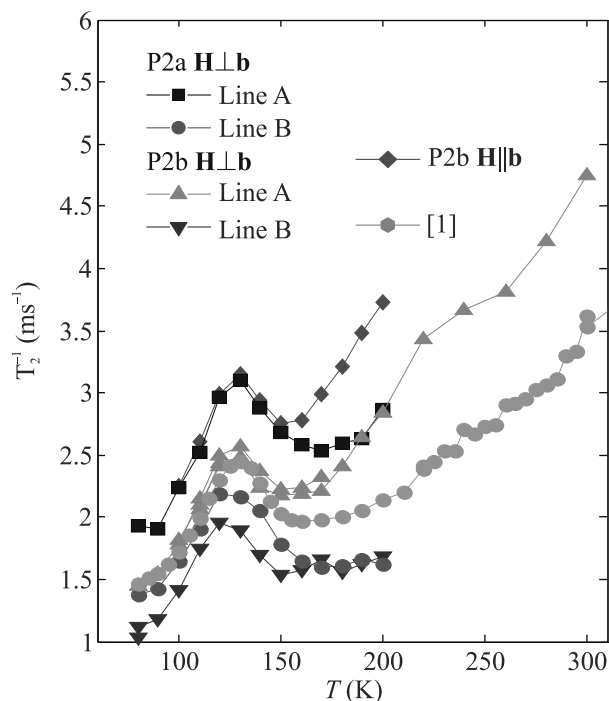


Рис. 2. (Цветной онлайн) Температурные зависимости скорости релаксации поперечной ядерной намагниченности ^{93}Nb в образцах P2a и P2b при различной ориентации магнитного поля $\mathbf{H}$. Для образца P2b для случая $\mathbf{H} \parallel \mathbf{b}$ данные усреднены по линиям А и В, так как они плохо разрешены в спектре (см. рис. 1b). Также приведены ранее измеренные нами данные в неориентированном образце NbS_3 -II [1]

На рисунке 2 представлены результаты измерения температурной зависимости скорости релаксации T_2^{-1} линий А и В для обоих образцов. На всех температурных зависимостях наблюдается максимум T_2^{-1} . Максимум наблюдается на обеих группах линий и при двух ориентациях магнитного поля $\mathbf{H}$ относительно кристаллографической оси $\mathbf{b}$. На этом же рисунке представлены ранее полученные нами результаты измерения T_2^{-1} в неориентированном образце NbS_3 -II [1]. Схожесть особенностей на всех кривых $T_2^{-1}(T)$ показывает высокую воспроизводимость экспериментальных данных. Как и в [13], в случае NbSe_3 , максимумы достигаются при температурах немного ниже температуры формирования ВЗП. Это подтверждает его связь с переходом при $T_{P2} = 150$ К.

Мы связываем максимум T_2^{-1} с замедлением флуктуаций, происходящим в области 150–110 К при понижении температуры. Релаксация поперечной ядерной намагниченности обусловлена флуктуирующими полями, время корреляции которых сравнимо с временем формирования сигнала спинового эхо,

что составляет примерно 10–1000 мкс. Таким образом, наблюдаемые на рис. 2 локальные максимумы на зависимостях $T_2^{-1}(T)$ соответствуют тому, что с понижением температуры, ниже перехода 110–150 К, происходит вымерзание одного из источников этих флуктуирующих полей: выше максимума T_2^{-1} характерные времена флуктуаций слишком малые, а ниже максимума – слишком высокие для ускорения поперечной релаксации.

Удивительно, что, как следует из рис. 2, переход при $T_{P2} = 150$ К происходит не только в низкоомных, но и в высокоомных образцах. При этом максимум T_2^{-1} наблюдается на линиях ЯМР ^{93}Nb , частоты которых соответствуют *проводящим цепочкам* Nb в элементарной ячейке (рис. 1). Это значит, что переход затрагивает, как минимум, две из 4-х пар цепочек Nb во *всех* элементарных ячейках NbS_3 , а не только атомы Nb вблизи дефектов кристалла [4].

Значения T_2^{-1} (рис. 2) подтверждают отличие составов образцов P2a и P2b: если сравнивать одни и те же линии, T_2^{-1} выше на P2a, чем на P2b. Это означает преобладание относительно низкоомных вискеро- в образце P2a.

Отметим и другие особенности кривых на рис. 2. Для линии А наблюдаемые скорости ядерной релаксации выше, чем для линии В, что, как мы отметили выше, соответствует более высокой концентрации свободных носителей на цепочках типа А. На обоих образцах максимум $T_2^{-1}(T)$ для линии В примерно на 10 К ниже, чем для линии А, что также можно объяснить большими временами релаксации на цепочках типа В: частота флуктуаций сравнивается с обратным временем релаксации этой линии при более низких температурах. Также можно отметить, что абсолютные величины T_2^{-1} в ориентации $\mathbf{H} \parallel \mathbf{b}$ выше, чем при $\mathbf{H} \perp \mathbf{b}$. Это можно интерпретировать как небольшую анизотропию флуктуирующих полей на ядрах ^{93}Nb : вдоль оси цепочек $\mathbf{b}$ амплитуда флуктуирующих полей больше, чем поперек.

Были также проведены измерения температурной зависимости скорости релаксации продольной ядерной намагниченности $T_1^{-1}(T)$, однако в ней никаких локальных максимумов в области перехода $T_{P2} = 150$ К не наблюдалось. Вообще говоря, максимум скорости продольной релаксации должен наблюдаться при условии, что частота флуктуирующих полей совпадает с частотой ЯМР наблюдаемого сигнала, 79 МГц. В отличие от продольной, релаксация поперечной ядерной намагниченности обусловлена более медленными флуктуирующими полями, время корреляции которых порядка единиц микро- секунд. Отсутствие максимума $T_1^{-1}(T)$ может озна-

чать, что колебания решетки, принадлежащие вымерзающей при T_{P2} моде, даже выше T_{P2} , достаточно медленные и не оказывают влияния на релаксацию продольной намагниченности ни при каких температурах. В этом – важное отличие перехода в NbS_3 -II при 150 К от перехода в $NbSe_3$ при 140 К [13].

Если в $NbSe_3$ [13] T_2^{-1} возрастает почти в 2 раза, в NbS_3 -II T_2^{-1} возрастает только на $\approx 30\%$. Это может означать, что источник флуктуаций второстепенный или удаленный. Кроме того, как видно из рис. 1, в диапазоне температур 100–200 К не происходит изменений положения линий в спектре ЯМР ^{93}Nb . Это означает, что величины магнитных полей на ядрах остаются неизменными. Следовательно, флуктуирующее поле, исчезающее около 130 К, является, скорее всего, электрическим.

Итак, наблюдение максимума T_2^{-1} на всех линиях ЯМР означает, что вблизи $T_{P2} = 150$ К в образцах NbS_3 -II, не только низкоомных, но и в высокоомных, происходит возникновение (или критическое замедление) некоего упорядочения, затрагивающего **все виды** проводящих цепочек. Это заключение стало для нас основанием для более тщательного анализа транспортных свойств высокоомных образцов NbS_3 -II. Зависимость $\sigma_s(T)$ таких образцов следует активационному закону от 330 К до, как минимум, 75 К. Максимальная величина энергии активации, $\Delta \approx 2000$ К, наблюдается в образцах без признаков перехода при T_{P2} [1, 5], в согласии с данными исследования фотопроводимости: $2\Delta = 430$ мэВ (2×2500 К) [17]. ВАХ высокоомных NbS_3 -II имеют нелинейный вид в диапазоне от T_{P1} до гелиевых температур [6], причем во всем этом диапазоне нелинейность связана со скольжением ВЗП-1. Это ясно, в частности, из температурной зависимости E_t : как видно из рис. 3, пороговое поле, которое мы определяли по началу нелинейности, растет по линейному закону с понижением температуры от 300 до примерно 30 К. Отметим, что в других квазиодномерных проводниках с ВЗП такая зависимость $E_t(T)$ не наблюдается. Ход $E_t(T)$, близкий к линейному, ранее наблюдался только в квазидвумерных соединениях, – трителлуридах редкоземельных металлов [18, 19].

Хотя на зависимостях $E_t(T)$ не видно существенных особенностей в области 150 К (рис. 3), ниже 150 К на ВАХ наблюдается размытие порога: срыв ВЗП-1 становится менее резким. Это видно из рис. 4, на котором приведены зависимости дифференциальной проводимости σ_d от напряжения V для одного из образцов. Для количественного описания раз-

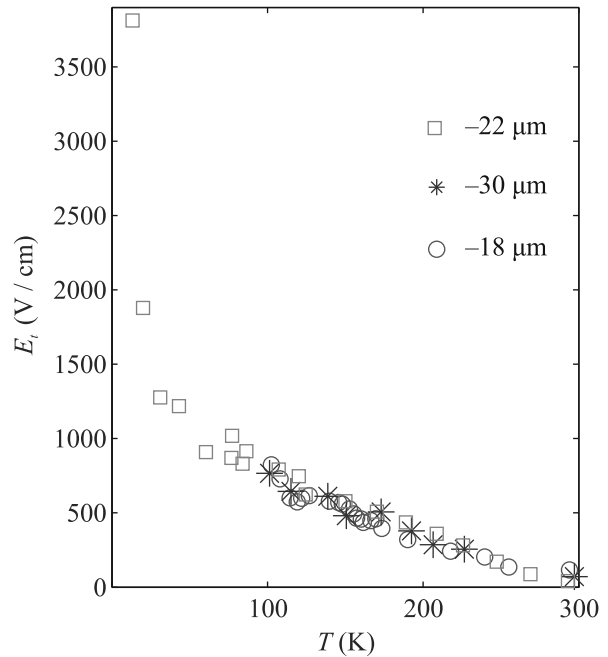


Рис. 3. (Цветной онлайн) Температурные зависимости порогового поля E_t для высокоомных образцов NbS_3 -II # 1 ($22 \text{ мкм} \times 0.01 \text{ мкм}^2$), # 2 ($18 \text{ мкм} \times 0.01 \text{ мкм}^2$) и # 3 ($30 \text{ мкм} \times 0.007 \text{ мкм}^2$)

мытия кривые $\sigma_d(E)$ в области полей ниже порогового были приближены квадратичным полиномом: $\sigma_d/\sigma_d(0) = 1 + kE^2$. Значения k в зависимости от T для двух высокоомных образцов показаны на вставке к рис. 4. Видно, что резкий рост размытия начинается именно вблизи 150 К. Это означает, что данная температура является особой и для высокоомных образцов.

В поисках непротиворечивого объяснения экспериментальных данных мы пришли к предположению, что во всех образцах NbS_3 -II при 150 К происходит фазовый переход с образованием сверхструктуры, механизм которого не является пайерлсовским. Одна из возможностей – переход Яна–Теллера (см., например, [20]). В высокоомных образцах искажение решетки оказывает слабое влияние на транспортные свойства. Так, размытие порогового поля ВЗП-1 ниже 150 К может быть связано с понижением симметрии решетки. В низкоомных же образцах волновой вектор искажения решетки q_2 оказывается близким к удвоенному фермиевскому волновому числу для электронов, остающихся свободными ниже T_{P1} . Эти электроны могут быть связаны с вакансиями серы и находиться в минизонах (“карманах”), связанных с дефектами решетки. Таким образом, ниже T_{P2} эти электроны оказываются в диэлектрическом состоянии и формируют ВЗП-2.

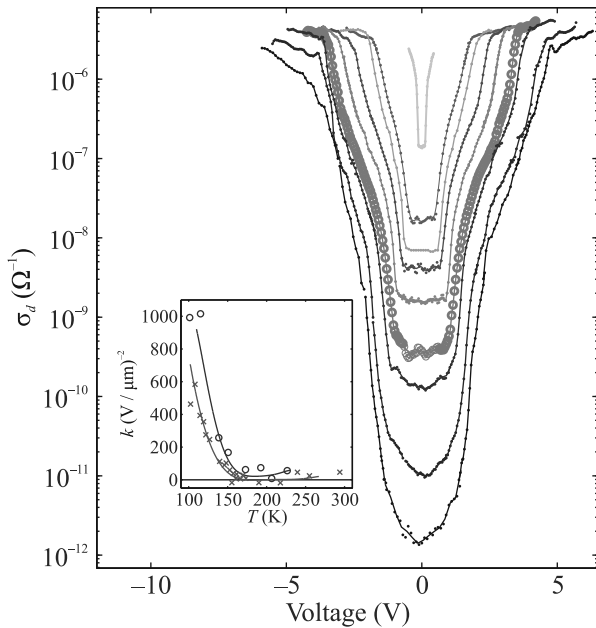


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимости дифференциальной проводимости σ_d от напряжения V для образца # 2 при $T = 101$ (нижняя кривая), 115, 139, 151 (выделена кружками), 173, 193, 206, 226, 247 и 297 K (верхняя). Вставка: температурные зависимости параметра k (см. текст), отражающего степень размытия ВАХ ниже E_t для образцов # 2 (○) и # 3 (×). Сплошные линии проведены на глаз

Более вероятный механизм искажения решетки – переход Келдыша–Копаева [21], известный также как формирование экситонного диэлектрика [22]. В [1] было сделано предположение, что при T_{P2} реализуется механизм перехода, предложенный для случая узкозонного полупроводника, каковым может являться NbS_3 -II ниже двух пайерлсовских переходов (при T_{P0} и T_{P1}). Согласно статье Ю. В. Копаева в [23], данный переход, как и пайерлсовский, можно рассматривать как один из частных случаев формирования экситонного диэлектрика. В узкозонном полупроводнике переход возможен, если запрещенная зона меньше энергии связи экситона. В таком случае происходит спонтанное образование экситонов и развивается новое электронное состояние. Если максимум и минимум дырочной и электронной зон смещены в k -пространстве, вектор, соединяющий их, определяет волновой вектор возможной модуляции заряда, т.е. экситонную ВЗП. Если энергия Ферми находится вблизи середины запрещенной зоны, что соответствует случаю стехиометрического состава NbS_3 , образец находится в диэлектрическом состоянии еще выше T_{P2} , и переход в $\sigma_s(T)$ практически незаметен.

Хотя скольжение такой ВЗП не обсуждалось, можно предположить, что оно вполне возможно. В случае собственного полупроводника эта ВЗП не несет заряда, или, иными словами, содержит поровну электронов и дырок. Это понятно из электронно-дырочной симметрии системы. В образцах же с вакансиями серы возникает избыток электронов, и можно предположить, что ВЗП становится заряженной, причем плотность ее заряда будет пропорциональна степени легирования вакансиями S. Данный механизм объясняет объемный характер ВЗП-2, универсальность ее формирования в NbS_3 -II всех типов, и, в то же время, изменяющееся в широком диапазоне значение j_{CDW}/f [1].

Необходимо также упомянуть результаты недавней обработки рентгеноструктурных данных, полученных на кристаллах NbS_3 -II в синхротронном излучении. Дифрактограммы были сняты в широком диапазоне температур с шагом 10 K. Обнаружено, что, начиная со 150 K и выше, наблюдается диффузный сателлит, имеющий компоненты $n(4\mathbf{c}^*) + m(\mathbf{a}^* - \mathbf{c}^*)$, где n и m – целые числа, а также компоненту $0.5\mathbf{b}^*$. Появление рефлекса $4\mathbf{c}^*$ соответствует уменьшению периода вдоль оси $\mathbf{c}$ в 4 раза. Таким образом, параметры флуктуационно возникающей структуры соответствуют элементарной ячейке фазы I NbS_3 [2]. Возможность непрерывного перехода к фазе I согласуется с моделью [24], согласно которой элементарную ячейку структуры фазы II можно приближенно получить четырехкратным повторением в направлении с элементарной ячейки базовой структуры NbS_3 фазы I. С учетом этих данных результаты ЯМР можно интерпретировать следующим образом: вымерзающая ниже 150 K мода соответствует флуктуационному приближению фазы II к фазе I. Удвоение по оси $\mathbf{b}$ выше 150 K подтверждает это предположение. Флуктуации подавляют ВЗП-2 выше 150 K; они также могут приводить к росту и размытию порогового поля депиннинга этой ВЗП. При этом данное объяснение оставляет открытым вопрос о природе самой ВЗП-2.

В заключение, в NbS_3 -II всех типов при $T_{P2} = 150$ K происходит вымерзание (критическое замедление частоты колебаний) некоторой второстепенной моды, равноудаленной от атомов Nb, находящихся во всех узлах решетки, причем – не принадлежащим дефектам кристалла. Данное искажение решетки объясняет появление ВЗП-2 в низкоомных образцах NbS_3 -II и размытие порогового поля депиннинга ВЗП-1 ниже T_{P2} – в высокоомных.

Авторы благодарны А. А. Босаку за помощь в измерениях и обработку экспериментальных данных.

Финансирование работы. Электрофизические исследования NbS₃ выполнены С. Г. Зыбцевым при поддержке Российского научного фонда, проект # 22-12-00319. Анализ полученных результатов выполнен В. Я. Покровским в рамках Госзадания.

Конфликт интересов. Отсутствует.

1. S. G. Zybtsev, V. Ya. Pokrovskii, V. F. Nasretdinova et al. (Collaboration), Phys. Rev. B **95**, 035110 (2017).
2. P. Monceau, Adv. Phys. **61**, 325 (2012).
3. S. G. Zybtsev, V. Ya. Pokrovskii, V. F. Nasretdinova, S. V. Zaitsev-Zotov, E. Zupanic, M. van Midden, W. Wu. Pai, J. Alloys Compd. **854**, 157098 (2021).
4. E. Zupanic, H. J. P. van Midden, M. van Midden, S. Sturm, E. Tchernychova, V. Ya. Pokrovskii, S. G. Zybtsev, V. F. Nasretdinova, S. V. Zaitsev-Zotov, W. T. Chen, W. Wu. Pai, J. C. Bennett, and A. Prodan, Phys. Rev. B **98**, 174113 (2018).
5. S. G. Zybtsev, V. Ya. Pokrovskii, V. F. Nasretdinova, S. V. Zaitsev-Zotov, V. V. Pryadun, E. S. Kozlyakova, O. S. Volkova, A. N. Vasiliev, W. W. Pai, and D. Staresinic, Phys. Rev. B **99**, 235155 (2019).
6. С. Г. Зыбцев, В. Я. Покровский, В. Ф. Насретдинова, С. В. Зайцев-Зотов, Радиотехника и электроника **63**, 992 (2018).
7. T. Iwazumi, M. Izumi, K. Uchinokura, R. Yoshizaki, and E. Matsuura, Physica B **143**, 255 (1986).
8. С. Г. Зыбцев, Н. Ю. Табачкова, В. Я. Покровский, С. А. Никонов, А. А. Майзлах, С. В. Зайцев-Зотов, Письма в ЖЭТФ **114**, 36 (2021).
9. W. W. Pai, M. W. Chu, W. T. Chen, V. Ya. Pokrovskii, S. V. Zaitsev-Zotov, S. G. Zybtsev, V. F. Nasretdinova, M. D. Ustenko, E. Zupanic, H. J. P. van Midden, M. van Midden, S. Sturm, A. Prodan, E. Tchernychova, and J. C. Bennett, Труды XXII Международного симпозиума “Нанофизика и нанoeлектроника” **1**, 285, издательство Нижегородского государственного университета им. Н. И. Лобачевского, Н. Новгород (2018); ISBN 978-5-91326-446-6.
10. X. Xi, L. Zhao, Z. Wang, H. Berger, L. Forro, J. Shan, and K. F. Mak, Nature Nanotechnology **10**, 765 (2015).
11. C. Sergio, M. R. Sinko, D. P. Gopalan, N. Sivadas, K. L. Seyler, K. Watanabe, T. Taniguchi, A. W. Tsen, X. Xu, Di Xiao, and B. M. Hunt, Nat. Commun. **9**, 1 (2018).
12. E. Navarro-Moratalla, J. O. Island, S. Manas-Valero, E. Pinilla-Cienfuegos, A. Castellanos-Gomez, J. Quereda, G. Rubio-Bollinger, L. Chiroli, J. A. Silva-Guillen, N. Agrait, G. A. Steele, F. Guinea, H. S. J. van der Zant, and E. Coronado, Nat. Commun. **7**, 1 (2016).
13. B. H. Suits and C. P. Slichter, Phys. Rev. B **29**, 41 (1984).
14. W. G. Clark, M. E. Hanson, F. Lefloch, and P. Segransan, Rev. Sci. Instrum. **66**, 2453 (1995).
15. I. Mukhamedshin, Workshop on Magnetic Resonance of Correlated Electron Materials, 17–23 September 2023, Dresden, Germany. Abstracts, p. 82; https://www.ifw-dresden.de/uploads/users/155/uploads/abstracts_fin2.pdf.
16. А. С. Семакин, И. Р. Мухамедшин, С. Г. Зыбцев, В. Я. Покровский, Труды XXVIII Международного симпозиума, 11–15 марта 2024 г., издательство Нижегородского государственного университета им. Н. И. Лобачевского, Н. Новгород (2024).
17. V. Nasretdinova, V. Ya. Pokrovskii, S. V. Zaitsev-Zotov, and S. G. Zybtsev, Nonequilibrium Phenomena in Complex Matter: new observations and new theories, Ambrož, Krvavec, Slovenia, 13–16 December 2015, BOOK OF ABSTRACTS, Jožef Stefan Institute, Ljubljana, p. 46.
18. A. A. Sinchenko, P. Lejay, O. Leynaud, and P. Monceau, Phys. Rev. B **93**, 235141 (2016).
19. А. В. Фролов, А. П. Орлов, А. А. Синченко, П. Монсо, Письма в ЖЭТФ **109**, 196 (2019).
20. M. Holt, P. Zschack, H. Hong, M. Y. Chou, and T.-C. Chiang, Phys. Rev. Lett. **86**, 3799 (2001).
21. Л. В. Келдыш, Ю. В. Копаев, ФТТ **6**, 2791 (1964).
22. W. Kohn, Phys. Rev. Lett. **19**, 439 (1967).
23. Физическая энциклопедия, в 5 т., глав. ред. А. М. Прохоров, Советская энцикл. (1988); https://dic.academic.ru/dic.nsf/enc_physics/5271/ЭКСИТОННЫЙ.
24. A. Prodan, A. Budkowski, F. W. Boswell, V. Marinkovic, J. C. Bennett, and J. M. Corbett, J. Phys. C: Solid State Phys. **21**, 4171 (1988).

Модификация топологических поверхностных состояний в новых синтетических топологических системах $\text{Mn}_{1-x}\text{A}_x\text{Bi}_2\text{Te}_4/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ ($\text{A} = \text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}, \text{Pb}$)

Т. П. Естюнина¹⁾, А. В. Тарасов, А. В. Ерыженков, Д. А. Естюнин, А. М. Шикин

Санкт-Петербургский государственный университет, 198504 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 21 ноября 2023 г.

После переработки 14 февраля 2024 г.

Принята к публикации 18 февраля 2024 г.

В данной работе с помощью *ab initio* расчетов была исследована возможность изменения энергетической запрещенной зоны в топологических поверхностных состояниях систем на основе собственного антиферромагнитного топологического изолятора MnBi_2Te_4 . Системы получены путем замещения атомов магнитного металла (Mn) на атомы немагнитных элементов ($\text{A} = \text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}, \text{Pb}$) в поверхностном семислойном блоке ($\text{Mn}_{1-x}\text{A}_x\text{Bi}_2\text{Te}_4/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$). Результаты исследования показали значительную модуляцию величины энергетической запрещенной зоны в широком диапазоне от 60 мэВ до 0 мэВ при увеличении концентрации замещения x . Более того, было обнаружено, что выбор замещающего элемента влияет на характер изменения величины энергетической запрещенной зоны. Так, для Si и Ge была выявлена монотонная зависимость величины энергетической запрещенной зоны от x , в то время как для Sn и Pb минимальное значение энергетической запрещенной зоны наблюдалось при $x = 0.75$. Полученные в работе результаты позволяют предположить, что основным механизмом модуляции энергетической запрещенной зоны в исследованных системах является изменение локализации топологических поверхностных состояний.

DOI: 10.31857/S1234567824060065, EDN: OVJPFU

1. Введение. Магнитные топологические изоляторы (ТИ) – это материалы, в которых благодаря уникальному сочетанию топологических свойств и магнетизма наблюдается ряд экзотических эффектов [1]. Вследствие нарушения симметрии обращения относительно времени в топологических поверхностных состояниях (ТПС) магнитных ТИ образуется энергетическая запрещенная зона (ЭЗЗ) в точке Дирака [2–4]. За счет этого в магнитных ТИ становится возможной реализация квантового аномального эффекта Холла [5–7] и магнитоэлектрического эффекта [8], что и обуславливает высокую перспективность использования магнитных ТИ в качестве материальной базы в квантовых устройствах нового поколения. При этом возможность управления величиной ЭЗЗ может иметь решающее значение для развития устройств на основе ТИ.

Одним из наиболее перспективных материалов является собственный антиферромагнитный ТИ MnBi_2Te_4 [9–14], который состоит из семислойных блоков (СБ), разделенных ван-дер-Ваальсовыми промежутками [9]. Каждый СБ состоит из 7 атомных слоев и имеет вид $\text{Te-Bi-Te-Mn-Te-Bi-Te}$.

СБ в MnBi_2Te_4 могут быть заменены блоками родственных ТИ с такой же пространственной группой симметрии $R\bar{3}m$, например, такими как Bi_2Te_3 или тройные соединения AM_2X_4 ($\text{A} = \text{Ge}, \text{Pb}, \text{Sn}; \text{M} = \text{Bi}, \text{Sb}; \text{X} = \text{Te}, \text{Se}$) [15–17]. Блоки MnBi_2Te_4 могут чередоваться с блоками Bi_2Te_3 , образуя семейство топологических материалов вида $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$, где $m = 0, 1, 2$ [18–20]. Кроме того, MnBi_2Te_4 может образовывать твердые растворы с ABi_2Te_4 ($\text{Mn}_{1-x}\text{A}_x\text{Bi}_2\text{Te}_4$) с любым уровнем замещения x . Заменяя атомы Mn на немагнитные атомы, можно управлять магнитными свойствами и электронной структурой материала, в частности, влиять на величину ЭЗЗ в точке Дирака и объемной ЭЗЗ. В работе [21] теоретически и экспериментально была показана возможность модуляции электронной структуры для системы $\text{Mn}_{1-x}\text{Pb}_x\text{Bi}_2\text{Te}_4$ во всем объеме кристалла. Аналогичные возможности модификации электронной структуры и величины ЭЗЗ в ТПС в точке Дирака были показаны в работе [22] при замене Mn на Sn, а в работе [23] – при замене Mn на Ge. Однако наряду с изменением величины ЭЗЗ в точке Дирака по мере увеличения концентрации замещающих атомов уменьшается величина объемной ЭЗЗ, и происходит топологиче-

¹⁾e-mail: i@tmakarova.ru

ский фазовый переход, приводящий к исчезновению ТПС и изменению топологической фазы материала.

В связи с этим в настоящее время одной из актуальных задач является поиск возможности и способа модификации электронной структуры ТИ без изменения его топологической фазы. В нашей предыдущей работе [24] было показано, что при замене Mn на Ge в поверхностном СБ MnBi_2Te_4 система остается в состоянии ТИ, при этом ТПС не исчезают при всех концентрациях замещения атомов Mn, что важно для практического использования в топологической спинтронике и квантовых вычислениях. Данная работа посвящена детальному анализу модификации электронной структуры и величины ЭЗЗ в точке Дирака при замещении Mn на элементы IV группы $A = \text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}, \text{Pb}$ в гетероструктуре $\text{Mn}_{1-x}\text{A}_x\text{Bi}_2\text{Te}_4/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$, где $x = 0.25, 0.5, 0.75, 1.0$, и замещение производится только в поверхностном СБ.

2. Методы. Расчеты электронной структуры были проведены с использованием программного кода OpenMX, в котором реализован полностью релятивистский метод функционала электронной плотности с использованием псевдопотенциалов, сохраняющих норму [25], и псевдоатомных орбиталей в качестве базисных функций [26–28]. Расчеты проводились в рамках обобщенного градиентного приближения с использованием его РВЕ-версии [29]. Для расчетов гетероструктур использовались суперячейки 2×2 , позволяющие учитывать четыре неэквивалентных положения атомов Mn в каждом слое. Гетероструктуры с концентрациями $x = 0.25, 0.5, 0.75$ и 1.0 были получены путем замены одного, двух, трех и четырех атомов Mn на атомы Si, Ge, Sn или Pb соответственно. Критерий сходимости по полной энергии – $1 \cdot 10^{-6}$ эВ, энергия отсечки – 450 Ry, к-сетка задавалась как $3 \times 3 \times 1$. Базисные функции задавались следующим образом: $\text{Bi}8.0 \text{ } s3p2d2f1$, $\text{Te}7.0 \text{ } s3p2d2f1$, $\text{Mn}6.0 \text{ } s3p2d1$. Состояния Mn $3d$ рассматривались в рамках подхода DFT + U [30] в схеме Дударева с параметром $U = 5.4$ эВ [9]. Исследуемая в работе поверхность была построена в рамках модели периодических кристаллических пластин, состоящих из 6 СБ. Вакуумный промежуток составлял 12 Å. В качестве элементарной ячейки для всех концентраций примеси в поверхностном СБ была использована структура, представленная в работе [31].

3. Результаты и обсуждение. На рисунке 1a–d показана электронная структура, полученная методом теории функционала плотности, для гетероструктур $\text{Mn}_{0.75}\text{A}_{0.25}\text{Bi}_2\text{Te}_4/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ ($A = \text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}, \text{Pb}$). Для исходной системы MnBi_2Te_4 ве-

личина ЭЗЗ в точке Дирака составляла 58 мэВ [31]. При уровне замещения $x = 0.25$ величина ЭЗЗ уменьшается до 33–35 мэВ для всех типов замещающих атомов. Электронная структура $\text{Mn}_{0.5}\text{A}_{0.5}\text{Bi}_2\text{Te}_4/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$, представленная на рис. 1e–h, показывает дальнейшее уменьшение ЭЗЗ до значений, равных 8, 11, 13 и 15 мэВ для гетероструктур с замещением Mn на Si, Ge, Sn и Pb соответственно. При дальнейшем увеличении концентрации замещающих атомов до $x = 0.75$ величина ЭЗЗ составляет 8, 8, 0 и 3 мэВ для Si, Ge, Sn и Pb соответственно. Можно отметить, что при замещении $\text{Mn} \rightarrow \text{Si}$ в случае $x = 0.5$ и $x = 0.75$ (рис. 1i) не меняется величина ЭЗЗ. Однако при этом наблюдаются некоторые изменения в электронной структуре $\text{Mn}_{1-x}\text{Si}_x\text{Bi}_2\text{Te}_4/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ (показано зелеными стрелками на рис. 1i). Для всех остальных замещающих элементов зонная структура меняется похожим образом при увеличении уровня замещения. Следовательно, выбор типа замещающего атома не оказывает значительного влияния на положение зон, существенное влияние оказывает только уровень замещения. Однако важно отметить, что в наших расчетах не учитываются возможные структурные изменения, которые могут зависеть от типа замещающих атомов, что в реальных кристаллах может оказывать существенное влияние на свойства гетероструктуры, как было показано для систем с объемным замещением Mn на атомы IV группы [21, 32, 33]. Стоит обратить внимание на случай с уровнем замещения $x = 1.0$, т.е. контакт немагнитного СБ ABi_2Te_4 и магнитного ТИ MnBi_2Te_4 . В этом случае наблюдается уменьшение ЭЗЗ до 0 и 2 мэВ для гетероструктур с заменой Mn на Si и Ge соответственно. При этом для гетероструктур с заменой Mn на Sn и Pb наоборот, при $x = 1.0$ ЭЗЗ увеличивается до 9 и 6 мэВ соответственно.

На рисунке 2 показана зависимость величины ЭЗЗ от концентрации атомов замещающих элементов. Наблюдаемые изменения величины ЭЗЗ можно разделить на 2 группы в зависимости от атомного номера замещающего элемента. Так, для Si и Ge наблюдается уменьшение ЭЗЗ по мере увеличения уровня замещения x . При этом в случае замены $\text{Mn} \rightarrow \text{Si}$ наблюдается небольшое плато при концентрациях замещения от $x = 0.5$ до 0.75 , хотя при дальнейшем увеличении концентрации продолжается уменьшение величины ЭЗЗ вплоть до нулевых значений. В случае замещения атомов Mn элементами с более высоким атомным номером Sn и Pb значения ЭЗЗ достигают минимума при концентрации $x = 0.75$, а далее наблюдается увеличение ЭЗЗ. Такое поведе-

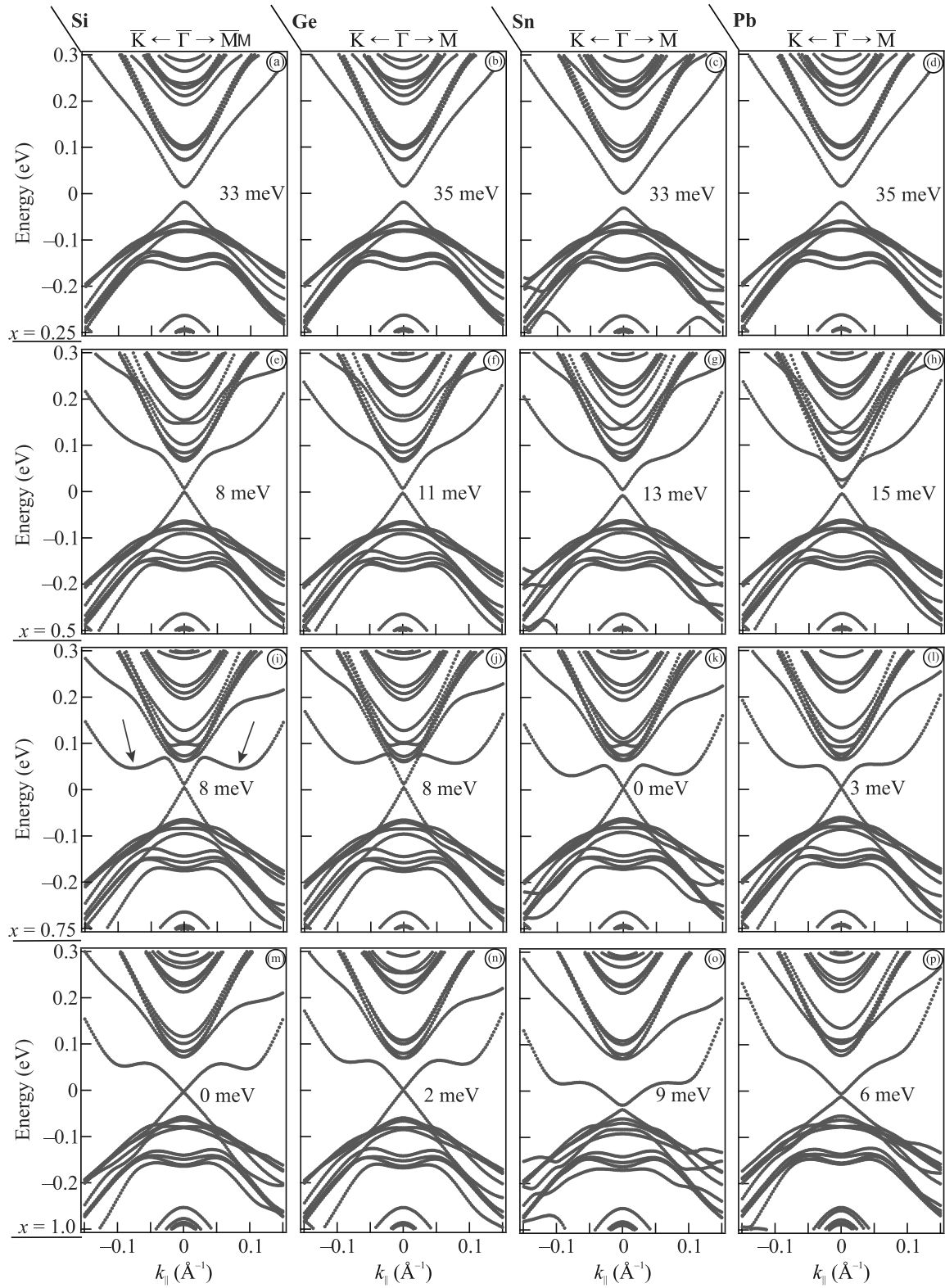


Рис. 1. (Цветной онлайн) Рассчитанная электронная структура гетероструктур $\text{Mn}_{1-x}\text{A}_x\text{Bi}_2\text{Te}_4/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ для $x = 0.25$ (a)–(d); 0.5 (e)–(h); 0.75 (i)–(l), 1.0 (m)–(p)

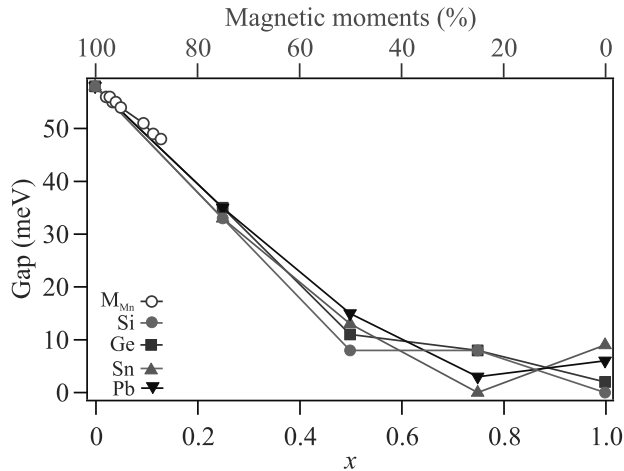


Рис. 2. (Цветной онлайн) Изменения величины ЭЗЗ при изменении концентрации Si, Ge, Sn и Pb. Величина ЭЗЗ в точке Дирака при уменьшении магнитного момента Mn в 1 СБ. (показана полыми кружками)

ние может быть связано с перераспределением ТПС вглубь кристалла при изменении концентрации замещения, что будет рассмотрено далее.

Магнитное разбавление, которое происходит при замене Mn на атомы немагнитных элементов IV группы, может приводить к уменьшению средней величины магнитного момента поверхностного СБ. В реальных (синтезированных) системах магнитное разбавление также приводит к изменению уровня дефектности и межслоевых расстояний внутри СБ [21]. Для более детального анализа влияния изменения магнитных свойств слоя Mn в 1 СБ на электронную структуру была проведена процедура уменьшения величин магнитных моментов атомов Mn в 1 СБ в пределах от 5 до $4.38 \mu_B$. Результаты расчетов представлены на рис. 2 и показаны полыми коричневыми кружками. При этом позиции магнитных атомов Mn не изменялись. Видно, что по мере уменьшения магнитного момента величина ЭЗЗ в точке Дирака также пропорционально уменьшается. При этом для гетероструктур $Mn_{1-x}A_xBi_2Te_4/MnBi_2Te_4$ при малых значениях x зависимость величины ЭЗЗ от x совпадает с теоретически рассчитанной зависимостью ЭЗЗ от величины магнитного момента Mn в 1 СБ. Таким образом, можно предположить, что по крайней мере вплоть до концентрации замещения $x = 0.5$ значительный вклад в изменение величины ЭЗЗ происходит вследствие уменьшения усредненного магнитного момента в поверхностном СБ (предполагается линейная зависимость величины ЭЗЗ от магнитного момента Mn). При этом в системах с замещением Mn $\rightarrow$ Sn и Pb в области большой концентрации x начи-

нается рост величины ЭЗЗ, что уже не может быть описано только уменьшением среднего значения магнитного момента СБ.

Связь пространственного распределения ТПС и величины ЭЗЗ в точке Дирака. Величина ЭЗЗ в точке Дирака существенно зависит от распределения ТПС между СБ с разными направлениями магнитных моментов [34]. В настоящей работе были проанализированы распределения ТПС по объему для всех замещающих элементов и рассчитываемых концентраций. На рисунке 3 показано распределение локализации ТПС по глубине слэба. На рисунке 3а показаны распределения для гетероструктуры $Mn_{1-x}Si_xBi_2Te_4/MnBi_2Te_4$ при всех рассчитанных x . Коричневый, красный, синий, черный и зеленый цвета отражают распределения для $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1.0$ соответственно. Относительный вклад атомов каждого СБ в ТПС показан на панели с рис. 3. На рисунке 3b,d показаны распределения для гетероструктур с замещением Mn на Ge; (e), (g) – Mn на Sn; (f), (h) – Mn на Pb.

Результаты показывают, что для каждого из замещающих элементов при значениях концентрации вплоть до $x = 0.75$ ТПС в основном локализованы в области 2 поверхностных СБ, и не происходит значительного перераспределения ТПС вглубь кристалла. Среди представленных результатов можно выделить случай полного замещения атомов Mn атомами немагнитных элементов в поверхностном СБ, а именно интерфейс тонкой немагнитной пленки на поверхности $MnBi_2Te_4$ (т. е. $ABi_2Te_4/MnBi_2Te_4$, где $A = Si, Ge, Sn, Pb$). Важно отметить, что для системы с замещением атомов Mn атомами Si и Ge по мере увеличения концентрации атомов замещающих элементов от $x = 0.75$ до $x = 1.0$ локализация ТПС наиболее ярко выражена в первом СБ и существенного перераспределения локализации ТПС в область третьего и четвертого СБ не происходит. На рисунке 3c,d показано, что в 1 СБ локализуется более 80 % ТПС (для сравнения в $MnBi_2Te_4$ – около 50 %). Таким образом, для $x = 1.0$ доля ТПС в СБ, содержащих магнитные атомы, становится незначительной.

Изменение пространственного распределения ТПС для гетероструктур с замещением Mn на Sn и Pb отличается от случаев замещения Mn на Si и Ge. ТПС перераспределяются в более глубоко лежащие СБ, а локализация в поверхностном СБ существенно не изменяется в сравнении с $MnBi_2Te_4$. Поскольку 2 соседних СБ связаны антиферромагнитно, на ТПС действуют обменные поля разных знаков [35]. Сдвиг плотности ТПС в область второго СБ наряду с уменьшением магнитного момента при

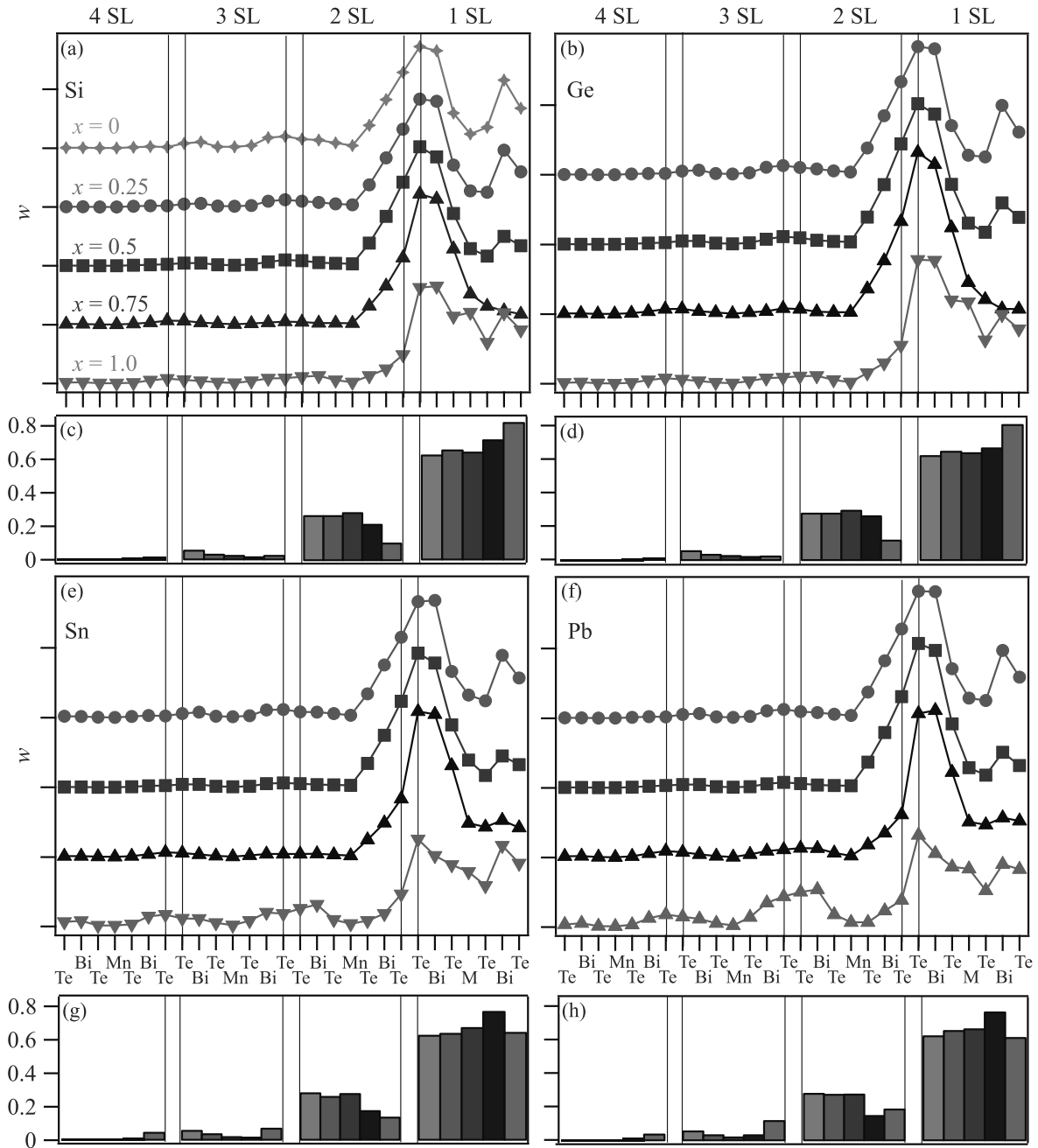


Рис. 3. (Цветной онлайн) Распределение локализации ТПС, взятых в области Г-точки для: (а) – $\text{Mn}_{1-x}\text{Si}_x\text{Bi}_2\text{Te}_4/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$; (б) – $\text{Mn}_{1-x}\text{Ge}_x\text{Bi}_2\text{Te}_4/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$; (е) – $\text{Mn}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Bi}_2\text{Te}_4/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$; (ф) – $\text{Mn}_{1-x}\text{Pb}_x\text{Bi}_2\text{Te}_4/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$. Вклады ТПС в каждый СБ для соответствующих гетероструктур показаны на панелях (с), (д), (г), (h) в виде столбчатой диаграммы в процентах. Значение x возрастает слева направо. На панели (а), (с) для сравнения приведены значения для системы MnBi_2Te_4 . $M=\text{Mn}_{1-x}A_x$; $A=\text{Si, Ge, Sn, Pb}$; $w \sim |\psi(Z)|^2$

замене магнитных атомов Mn на атомы немагнитных элементов уменьшает также и величину ЭЗЗ. При перераспределении ТПС в область третьего СБ, который характеризуется той же ориентацией магнитных моментов, что и в первом СБ, величина ЭЗЗ в точке Дирака вновь может начать увеличиваться

[35]. Это является возможным механизмом увеличения ЭЗЗ при концентрациях замещения $x > 0.75$ в гетероструктурах $\text{Mn}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Bi}_2\text{Te}_4/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ и $\text{Mn}_{1-x}\text{Pb}_x\text{Bi}_2\text{Te}_4/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$.

Количественной характеристикой влияния магнитных моментов атомов Mn на ТПС с учетом того,

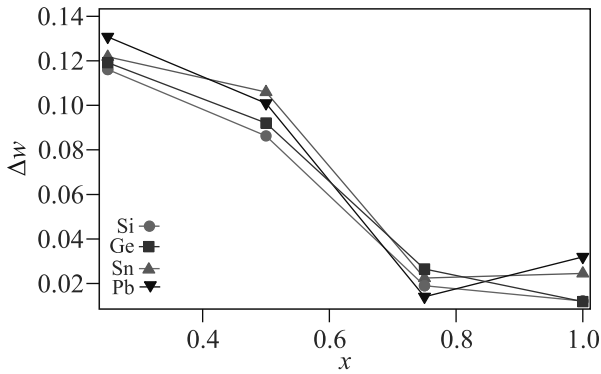


Рис. 4. (Цветной онлайн) Изменения эффективного магнитного момента, действующего на ТПС, в зависимости от концентрации замещения x

что их локализация может меняться вдоль слэба, может служить эффективный магнитный момент [35]. Следует отметить, что несмотря на то, что величина магнитного момента Mn значительно выше таковой для Te и Bi, именно в области атомов Te и Bi сосредоточена большая плотность ТПС. Таким образом, магнитные моменты Te и Bi также могут играть важную роль в формировании величины ЭЗЗ. Эффективный магнитный момент $\Delta w(z)$ вычислялся следующим образом: $\Delta w(z) \sim \sum_i |\psi_i|^2 \cdot M_i$, где $|\psi_i|^2$ — плотность ТПС на i -м атоме, M_i — величина магнитного момента на i -м атоме. На рисунке 4 показано, что значение Δw уменьшается для всех элементов при увеличении концентрации вплоть до $x = 0.75$. Такое поведение согласуется с изменениями величины ЭЗЗ от концентрации замещающих атомов (см. рис. 2). При дальнейшем увеличении концентрации до $x = 1.0$ для Si и Ge происходит уменьшение величины Δw , в то время как для Sn и Pb наблюдается увеличение Δw . Такое поведение согласуется с наблюдениями, сделанными ранее для зависимости величины ЭЗЗ от концентрации атомов замещающих элементов. При увеличении концентрации Sn и Pb происходит перераспределение ТПС между 2 и 3 СБ и появление локализации ТПС в третьем СБ, вследствие чего начинается рост ЭЗЗ. Полученные результаты дополнительно подтверждают связь изменения локализации ТПС с величиной ЭЗЗ в точке Дирака.

4. Заключение. В данной работе было проведено исследование изменений электронной структуры при замещении атомов Mn на немагнитные атомы элементов IV группы в поверхностном СБ для гетероструктур $\text{Mn}_{1-x}\text{A}_x\text{Bi}_2\text{Te}_4/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$, где $\text{A} = \text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}$ и Pb .

Было показано, что изменения зонной структуры зависят в большей степени от концентрации замеще-

ния x и практически не зависят от выбора замещающего элемента. Однако выбор замещающего элемента влияет на величину ЭЗЗ в точке Дирака. Так, для Si и Ge наблюдалось монотонное уменьшение величины ЭЗЗ от 58 мэВ при $x = 0$ до нулевых значений при $x = 1$. При замещении Mn на Sn и Pb минимум ЭЗЗ в точке Дирака достигался при $x = 0.75$, но при дальнейшем увеличении концентрации до $x = 1$ (т.е. контакт немагнитного СБ и MnBi_2Te_4) происходило небольшое увеличение ЭЗЗ. Подобное поведение величины ЭЗЗ можно объяснить ее связью с локализацией ТПС. В случае замещения Mn на Si, Ge локализация ТПС оказывается поверхностной: 80 % локализации ТПС находятся в 1 СБ, в котором отсутствуют атомы Mn. В случае полного замещения Mn на Sn или Pb ТПС перераспределяются в более глубоко лежащие СБ. В результате для данных гетероструктур ЭЗЗ в точке Дирака не закрывается. Показано, что замена поверхностных магнитных атомов Mn на немагнитные может быть использована для создания синтетических слоистых топологических структур с целенаправленно измененной ЭЗЗ в точке Дирака.

Финансирование работы. Данная работа финансировалась за счет средств гранта Российского научного фонда (# 23-12-00016) и гранта Санкт-Петербургского государственного университета (шифр проекта 95442847).

Конфликт интересов. Конфликт интересов отсутствует.

1. B. A. Bernevig, C. Felser, and H. Beidenkopf, *Nature* **603**, 41 (2022).
2. M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045 (2010).
3. X.-L. Qi, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, *Phys. Rev. B* **78**, 195424 (2008).
4. A. Bansil, H. Lin, and T. Das, *Rev. Mod. Phys.* **88**, 021004 (2016).
5. X. Kou, Y. Fan, M. Lang, P. Upadhyaya, and K. L. Wang, *Solid State Commun.* **215**, 34 (2015).
6. C.-Z. Chang and M. Li, *J. Phys. Condens. Matter* **28**, 123002 (2016).
7. K. He and Q.-K. Xue, *Spin* **9**, 1940016 (2019).
8. T. Zhu, H. Wang, H. Zhang, and D. Xing, *npj Computational Materials* **7**, 121 (2021).
9. M. M. Otrokov, I. I. Klimovskikh, H. Bentmann et al. (Collaboration), *Nature* **576**, 416 (2019).
10. J. Li, Y. Li, S. Du, Z. Wang, B.-L. Gu, S.-C. Zhang, K. He, W. Duan, and Y. Xu, *Sci. Adv.* **5**, eaaw5685 (2019).
11. Y. J. Chen, L. X. Xu, J. H. Li et al. (Collaboration), *Phys. Rev. X* **9**, 041040 (2019).

12. P. Wang, J. Ge, J. Li, Y. Liu, Y. Xu, and J. Wang, *The Innovation* **2**, 100098 (2021).
13. Y. Tokura, K. Yasuda, and A. Tsukazaki, *Nat. Rev. Phys.* **1**, 126 (2019).
14. Y. Ando, *J. Phys. Soc. Jpn.* **82**, 102001 (2013).
15. K. Okamoto, K. Kuroda, H. Miyahara, K. Miyamoto, T. Okuda, Z. S. Aliev, M. B. Babanly, I. R. Amiraslanov, K. Shimada, H. Namatame, M. Taniguchi, D. A. Samorokov, T. V. Menshchikova, E. V. Chulkov, and A. Kimura, *Phys. Rev. B* **86**, 195304 (2012).
16. K. Kuroda, H. Miyahara, M. Ye et al. (Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **108**, 206803 (2012).
17. Y. Li, C. Huang, G. Wang, J. Hu, S. Duan, C. Xu, Q. Lu, Q. Jing, W. Zhang, and D. Qian, *Chin. Phys. B* **30**, 127901 (2021).
18. L. Ding, C. Hu, F. Ye, E. Feng, N. Ni, and H. Cao, *Phys. Rev. B* **101**, 020412 (2020).
19. I. I. Klimovskikh, M. M. Otrokov, D. Estyunin et al. (Collaboration), *npj Quantum Mater.* **5**, 54 (2020).
20. A. M. Shikin, N. L. Zaitsev, A. V. Tarasov, T. P. Makarova, D. A. Glazkova, D. A. Estyunin, and I. I. Klimovskikh, *JETP Lett.* **116**, 556 (2022).
21. T. Qian, Y.-T. Yao, C. Hu, E. Feng, H. Cao, I. I. Mazin, T.-R. Chang, and N. Ni, *Phys. Rev. B* **106**, 045121 (2022).
22. A. V. Tarasov, T. P. Makarova, D. A. Estyunin, A. V. Eryzhenkov, I. I. Klimovskikh, V. A. Golyashov, K. A. Kokh, O. E. Tereshchenko, and A. M. Shikin, *Symmetry* **15**, 469 (2023).
23. A. S. Frolov, D. Y. Usachov, A. V. Tarasov et al. (Collaboration), arXiv preprint arXiv:2306.13024 (2023).
24. T. P. Estyunina, A. M. Shikin, D. A. Estyunin, A. V. Eryzhenkov, I. I. Klimovskikh, K. A. Bokai, V. A. Golyashov, K. A. Kokh, O. E. Tereshchenko, S. Kumar, K. Shimada, and A. V. Tarasov, *Nanomaterials* **13**, 2151 (2023).
25. N. Troullier and J. L. Martins, *Phys. Rev. B* **43**, 8861 (1991).
26. T. Ozaki, *Phys. Rev. B* **67**, 155108 (2003).
27. T. Ozaki and H. Kino, *Phys. Rev. B* **69**, 195113 (2004).
28. T. Ozaki and H. Kino, *Phys. Rev. B* **72**, 045121 (2005).
29. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
30. M. J. Han, T. Ozaki, and J. Yu, *Phys. Rev. B* **73**, 045110 (2006).
31. T. P. Makarova, A. M. Shikin, A. V. Eryzhenkov, and A. V. Tarasov, *JETP* **136**, 630 (2023).
32. D. Zhang, M. Shi, T. Zhu, D. Xing, H. Zhang, and J. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 206401 (2019).
33. D. A. Estyunin, A. A. Rybkina, K. A. Kokh, O. E. Tereshchenko, M. V. Likholetova, I. I. Klimovskikh, and A. M. Shikin, *Magnetochemistry* **9**, 210 (2023).
34. A. M. Shikin, T. P. Makarova, A. V. Eryzhenkov, D. Yu. Usachov, D. A. Estyunin, D. A. Glazkova, I. I. Klimovskikh, A. G. Rybkin, and A. V. Tarasov, *Physica B: Condensed Matter* **649**, 414443 (2023).
35. A. M. Shikin, D. A. Estyunin, N. L. Zaitsev et al. (Collaboration), *Phys. Rev. B* **104**, 115168 (2021).

Связь хрупкости металлических стекол с энтропией смешения и избыточной энтропией по отношению к материнскому кристаллу

Р. А. Кончаков⁺¹⁾, А. С. Макаров⁺, Г. В. Афонин⁺, Ц. Ч. Цзюа^{*2)}, Н. П. Кобелев[×], В. А. Хоник⁺

⁺ Воронежский государственный педагогический университет, 394043 Воронеж, Россия

^{*}Northwestern Polytechnical University, 710072 Xi'an, China

[×] Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка, Россия

Поступила в редакцию 8 февраля 2024 г.

После переработки 17 февраля 2024 г.

Принята к публикации 18 февраля 2024 г.

Определена избыточная энтропия ΔS по отношению к материнскому кристаллу для 18-ти металлических стекол, отличающихся по энтропии смешения ΔS_{mix} . На этой основе в рамках модели Адама–Гиббса определена термодинамическая хрупкость $m_{\Delta S}$. Показано, что $m_{\Delta S}$ растет с ΔS_{mix} , но снижается с ростом ΔS , отражающей степень структурной неупорядоченности стекла. Сделан вывод о том, что так называемые “высокоэнтропийные стекла” (т.е. имеющие высокие ΔS_{mix}) на самом деле являются наиболее упорядоченными и наименее склонными к релаксации свойств.

DOI: 10.31857/S1234567824060077, EDN: RBLAHM

Введение. Одной из важнейших характеристик переохлажденных жидкостей и стекол является хрупкость (англ. *fragility*), которая определяется как скорость изменения логарифма сдвиговой вязкости по отношению к нормированной обратной температуре, рассчитанная при температуре стеклования T_g (см. формулу (4) ниже) [1–3]. Хрупкость коррелирует со многими параметрами стекол. Для металлических стекол (МС) установлены корреляции хрупкости со стеклообразующей способностью [4, 5], коэффициентом Пуассона [6], твердостью [7, 8], пластичностью [9], модулем сдвига и бозонным пиком теплоемкости [10], калориметрической температурой стеклования [11] и др. Недавно было показано, что хрупкость МС может быть рассчитана исходя из релаксации высокочастотного модуля сдвига в состоянии переохлажденной жидкости [12, 13].

Особый интерес представляет корреляция хрупкости с избыточной энтропией [14, 15], под которой обычно понимается разность энтропии переохлажденной жидкости и кристалла того же химического состава. Энтропийный подход в настоящее время активно развивается, что связано с открытием относительно новых материалов – высокоэнтропийных сплавов [16], в том числе высокоэнтропийных МС, имеющих по определению высокую энтропию смешения [17–20].

Несмотря на понимание прямой связи хрупкости со свойствами переохлажденной жидкости на атомном уровне [21–23], однозначное количественное описание этой взаимосвязи до сих пор не получено. Немиловым была показано, что взаимосвязь структурных характеристик стекол с хрупкостью может быть интерпретирована лишь для ограниченного числа семейств простейших стекол [2].

Различают кинетическую (определяемую из сдвиговой вязкости) и термодинамическую (определяемую из калориметрических измерений) хрупкости, значения которых согласуются [22]. При этом термодинамическая хрупкость определяется обычно при немного более высоких температурах и оказывается по величине несколько больше кинетической [22]. В работе [24] для ряда органических стекол были проведены расчеты термодинамической хрупкости. Для металлических стекол проводились исследования взаимосвязи химического состава с хрупкостью [25], но связь хрупкости с энтропией не анализировалась.

Структурная взаимосвязь между хрупкостью и термодинамическими характеристиками стекол может быть определена исходя из широко распространенного представления о структуре стекол как об аморфной матрице, содержащей дефекты [26]. В работе [27] на примере 10-ти МС было показано, что избыточная энтропия и избыточная энергия стекол по отношению к материнскому кристаллическому

¹⁾ e-mail: konchakov.roman@gmail.com

²⁾ J. C. Qiao.

состоянию³⁾ практически полностью определяется подсистемой дефектов. При этом избыточная энтропия может быть легко вычислена путем интегрирования теплового потока, измеренного методом дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) [12].

Таким образом, представляется актуальным определение связи хрупкости МС, в том числе высокоэнтропийных, с их избыточной энтропией, рассчитанной из калориметрических измерений. На величину избыточной энтропии может влиять энтропия смешения, определяемая как $\Delta S_{\text{mix}} = -R \sum_{i=1}^n c_i \ln c_i$, где R – универсальная газовая постоянная, c_i – атомная концентрация компонентов стекла. Поэтому оценка соотношения хрупкости и энтропии смешения также представляет интерес.

Расчет хрупкости. Известная модель Адама–Гиббса связывает кинетическое поведение переохлажденной жидкости с ее термодинамическим параметром – конфигурационной энтропией S_{conf} [28]. Согласно этой модели, время релаксации τ связано с S_{conf} соотношением

$$\tau(T) = \tau_0 \exp \left[\frac{A}{TS_{\text{conf}}(T)} \right], \quad (1)$$

где A – энергетический барьер для релаксационных атомных перестроек, и константа τ_0 имеет порядок обратной дебаевской частоты [29]. Применение формулы (1), однако, ограничено, поскольку количественно определить энтропию S_{conf} весьма трудно. Тем не менее, модель Адама–Гиббса упоминается практически во всех обзорах по физике стекол для качественной интерпретации структурного замораживания переохлажденных расплавов (см., например, подробную работу [29]).

Известно, что вблизи температуры стеклования T_g избыточная энтропия МС является в основном конфигурационной [30, 31], поэтому можно принять $S_{\text{conf}} \approx \gamma \Delta S$, где ΔS – молярная избыточная энтропия стекла по отношению к материнскому кристаллу и $\gamma = 0.90 \div 0.95$. В качестве оценки энергетического барьера разумно выбрать молярную упругую энергию дефектов в стекле $A = \alpha \Omega G(T_g) N_A$ [27], где Ω – объем в расчете на атом, $G(T_g)$ – модуль сдвига при $T = T_g$, N_A – число Авогадро и безразмерный параметр $\alpha = 0.90 \div 0.95$ [27, 12]. Тогда, принимая $\alpha/\gamma \approx 1$, время релаксации можно переписать в виде

$$\tau(T) = \tau_0 \exp \left[\frac{\Omega G(T_g) N_A}{T \Delta S(T)} \right]. \quad (2)$$

Предполагая известную связь сдвиговой вязкости η с модулем сдвига, $\eta = \tau G(T_g)$, для десятичного логарифма вязкости вблизи T_g получаем

$$\log [\eta(T)] = \log G(T_g) + \log(\tau_0) + \frac{\Omega G(T_g) N_A \log(e)}{T \Delta S(T)}, \quad (3)$$

где первое слагаемое справа очень слабо зависит от температуры. Хрупкость при этом окончательно принимает вид

$$m \equiv \left. \frac{d[\log(\eta)]}{d(T_g/T)} \right|_{T=T_g} \approx \frac{\Omega G(T_g) N_A \log(e)}{T_g \Delta S(T_g)}. \quad (4)$$

Методика экспериментов. Образцы исходных МС готовились в виде пластин $2 \times 10 \times (30 \div 50)$ мм³ методом вакуумного всасывания расплава в медную изложницу, а их некристалличность контролировалась рентгеновским методом. Измерения методом ДСК выполнялись на приборе Hitachi DSC 7020 в атмосфере азота особой чистоты (99.999 %) с использованием образцов массой около 70 мг. Измерения проводились при скорости нагрева 3 К/мин до температуры полной кристаллизации T_{cr} . После измерения теплового потока от МС в исходном состоянии W_g и охлаждения до комнатной температуры измерялся тепловой поток W_c , исходящий от того же образца в кристаллическом состоянии, и далее вычислялся дифференциальный тепловой поток $\Delta W = W_g - W_c$. Некоторые другие детали измерений ДСК представлены в [20]. Избыточная энтропия стекла по отношению к материнскому кристаллу вычислялась далее как⁴⁾ [12]

$$\Delta S(T) = \frac{1}{T} \int_T^{T_{cr}} \frac{\Delta W(T)}{T} dT. \quad (5)$$

где $\dot{T}$ – скорость нагрева.

Измерения модуля сдвига G были выполнены методом электромагнитного акустического преобразования [13] на частотах 500–700 кГц на образцах размером $5 \times 5 \times 2$ мм³ в вакууме ≈ 0.01 Па. Абсолютная ошибка измерений G оценивалась в 1–2 %, точность

³⁾ Под материнским кристаллом понимается поликристаллическая структура, возникшая в результате полной кристаллизации стекла и не претерпевшая каких-либо последующих фазовых превращений [26].

⁴⁾ Подчеркнем, что в литературе, как правило, вычисляется избыточная энтропия переохлажденной жидкости при ее охлаждении по отношению к материнскому кристаллу (см., например, [32]), которая принципиально отличается от избыточной энтропии (5) твердого стекла относительно этого кристалла, измеряемой при нагреве до температуры кристаллизации T_{cr} .

измерения изменений модуля сдвига составляла 10–100 ppm в зависимости от температуры.

Сдвиговая вязкость $\eta(T)$ определялась на основе измерений ползучести в условиях изохронного нагрева со скоростью 3 К/мин в вакууме ≈ 0.01 Па, частота оцифровки данных составляла 0.1 Гц, более детальное описание дано в работе [12].

Результаты и обсуждение. Всего нами было исследовано 18 металлических стекол, отличающихся энтропией смешения ΔS_{mix} (см. вышеприведенное определение этой величины). На рисунке 1 в качестве типичного примера показана температурная зависимость теплового потока ΔW для высокоэнтропийного МС $\text{Zr}_{35}\text{Hf}_{13}\text{Al}_{11}\text{Ag}_8\text{Ni}_8\text{Cu}_{25}$ (левая шкала). На вставке в увеличенном масштабе пунктирными линиями показано определение температуры стеклования T_g , которая соответствует началу эндотермической реакции. На том же рисунке приведена температурная зависимость модуля сдвига G стекла (правая шкала), также являющаяся типичной.

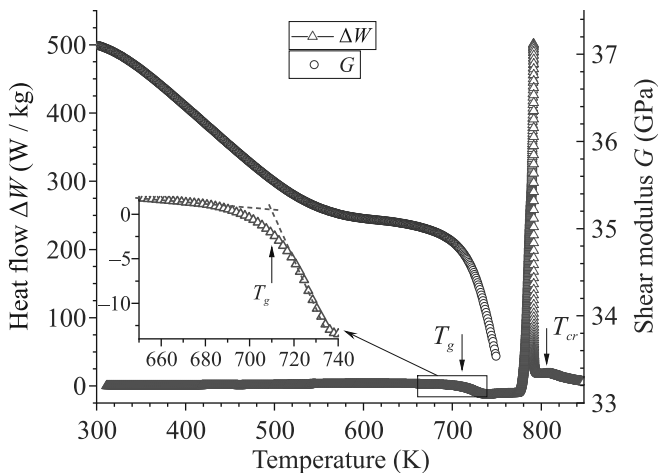


Рис. 1. (Цветной онлайн) Дифференциальный тепловой поток ΔW (левая шкала) и модуль сдвига G (правая шкала) в зависимости от температуры для высокоэнтропийного МС $\text{Zr}_{35}\text{Hf}_{13}\text{Al}_{11}\text{Ag}_8\text{Ni}_8\text{Cu}_{25}$. На вставке проиллюстрирован способ определения calorиметрической температуры стеклования T_g . Показана также температура полной кристаллизации T_{cr}

На рисунке 2 изображены характерные температурные зависимости избыточной энтропии ΔS трех-, пяти- и шестикомпонентных МС с последовательно увеличивающимися значениями нормированной энтропии смешения $\Delta S_{\text{mix}}/R$, от 0.93 до 1.79. Как видно, ΔS при всех температурах уменьшается с ростом ΔS_{mix} .

На рисунке 3 приведены температурные зависимости логарифма сдвиговой вязкости тех же трех

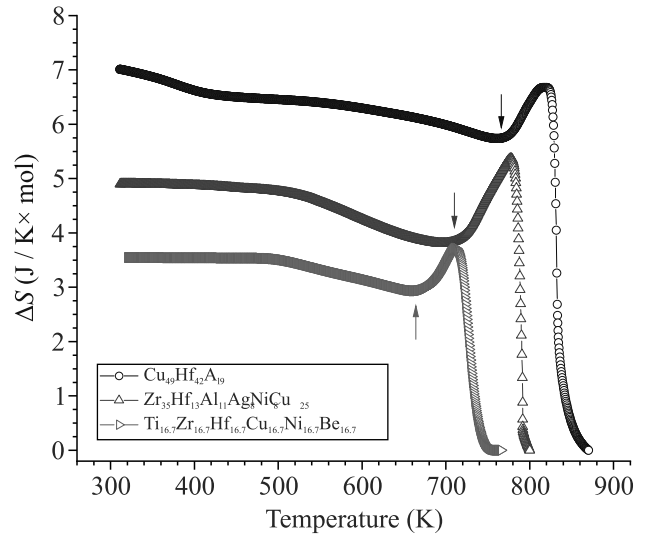


Рис. 2. (Цветной онлайн) Избыточная энтропия ΔS в зависимости от температуры для указанных МС, рассчитанная по данным ДСК по формуле (5). Стрелками показаны температуры стеклования T_g

стекол, выбранных в качестве примера. Скорость снижения $\log \eta$ быстро растет вблизи T_g и, в целом, рис.3 демонстрирует типичное для МС поведение.

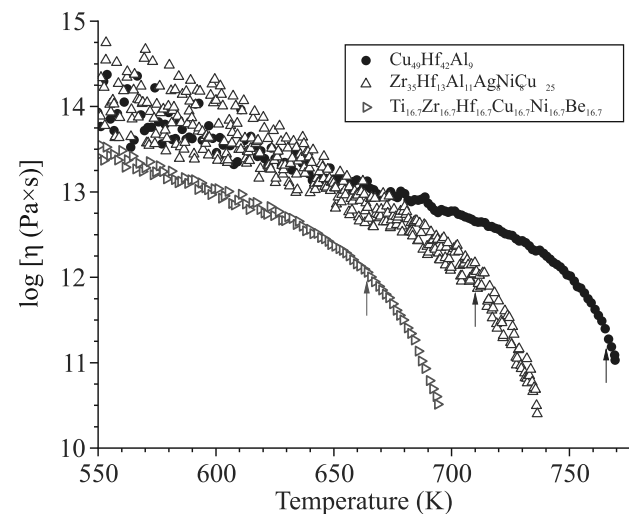


Рис. 3. (Цветной онлайн) Температурная зависимость логарифма сдвиговой вязкости для указанных МС. Стрелками отмечены calorиметрические температуры стеклования T_g

Для всех исследованных МС была выполнена проверка выполнения соотношения (3), т.е. соблюдения линейной зависимости $\log \eta$ от величины $(T\Delta S)^{-1}$ вблизи температуры стеклования, как это требует модель Адама–Гиббса. Соответствующий пример для тех же трех стекол показан на рис. 4.

Видно, что в области сдвиговой вязкости, соответствующей T_g (показано стрелками), $\log \eta$ практически линейно связан с $(T\Delta S)^{-1}$. Угловым коэффициентом этих зависимостей по своему физическому смыслу представляет собой характерный энергетический барьер атомных перестроек (постоянная A в формуле (1)). Например, для стекла $\text{Zr}_{65}\text{Al}_{10}\text{Ni}_{10}\text{Cu}_{15}$ коэффициент $A = 310 \text{ кДж/моль}$, что довольно близко к характерной энергии активации процесса α -релаксации $E_\alpha = 366 \text{ кДж/моль}$ для того же МС [33].

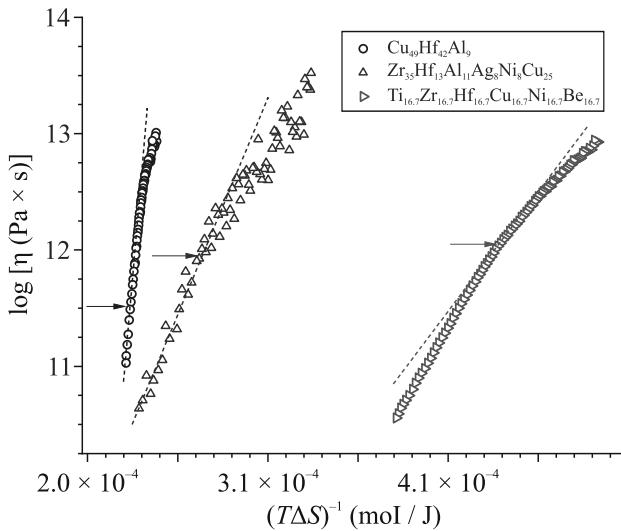


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимости $\log \eta$ от переменной $(T\Delta S)^{-1}$ для указанных МС. Стрелками отмечены вязкости, соответствующие температурам стеклования

В таблице 1 для всех исследованных стекол приведены температуры стеклования T_g , объемы в расчете на атом Ω , а также модули сдвига $G(T_g)$ и избыточные энтропии $\Delta S(T_g)$ при $T = T_g$. Используя формулу (4), для всех МС были рассчитаны термодинамические хрупкости $m_{\Delta S}$, приведенные в табл. 2. Там же указаны известные из литературы значения кинетической хрупкости m_η , хрупкости m_G , рассчитанной из релаксации модуля сдвига в состоянии переохлажденной жидкости по данным [12, 13], а также литературные значения кинетической хрупкости m_{lit} . Как видно из табл. 2, расчетные значения $m_{\Delta S}$ в целом согласуются с литературными данными (которые характеризуются большим разбросом хрупкостей даже для МС одинакового состава [12]), хотя и несколько превышают кинетическую хрупкость m_η , что, как упоминалось выше, вполне обычно. Таким образом, в расчетах времени релаксации и хрупкости в рамках модели Адама-Гиббса по формулам (1) и (4) можно использовать избыточную энтропию стекла по отно-

Таблица 1. Модуль сдвига $G(T_g)$, атомный объем Ω , температура стеклования T_g и избыточная энтропия $\Delta S(T_g)$ для указанных МС (ат. %) (стекла 7 и 15 являются эквивалентными)

#	Состав	$G(T_g)\Omega \times 10^{29}$ (ГПа) (м³)	T_g (К)	$\Delta S(T_g)$ ($\frac{\text{Дж}}{\text{К}\cdot\text{моль}}$)
1	$\text{Zr}_{65}\text{Al}_{10}\text{Ni}_{10}\text{Cu}_{15}$	29.2 2.1	618	9.0
2	$\text{Pd}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{20}$	36.0 1.3	564	7.5
3	$\text{Pd}_{41.25}\text{Cu}_{41.25}\text{P}_{17.5}$	29.3 1.3	543	4.0
4	$\text{Pd}_{40}\text{Cu}_{30}\text{Ni}_{10}\text{P}_{20}$	30.0 1.3	560	4.6
5	$\text{Cu}_{49}\text{Hf}_{42}\text{Al}_9$	39.0 1.7	766	5.7
6	$\text{Zr}_{46}\text{Cu}_{45}\text{Al}_7\text{Ti}_2$	31.6 1.7	683	4.4
7	TiZrHfCuNiBe	36.4 1.6	664	2.9
8	$\text{Pt}_{42.5}\text{Cu}_{27}\text{Ni}_{9.5}\text{P}_{21}$	30.6 1.4	512	5.9
9	$\text{Zr}_{56}\text{Co}_{28}\text{Al}_{16}$	31.7 1.8	726	7.3
10	$\text{Zr}_{55}\text{Co}_{25}\text{Al}_{20}$	33.9 1.9	737	6.0
11	$\text{La}_{55}\text{Al}_{25}\text{Co}_{20}$	14.7 2.7	455	8.5
12	$\text{La}_{55}\text{Ni}_{10}\text{Al}_{35}$	14.4 2.8	517	7.8
13	$\text{Zr}_{47.5}\text{Cu}_{47.5}\text{Al}_5$	30.2 1.7	681	5.3
14	$\text{Zr}_{48}\text{Cu}_{48}\text{Al}_4$	30.2 1.7	681	6.8
15	TiZrHfNiBe	41.2 1.8	625	4.6
16	$\text{Zr}_{31}\text{Ti}_{27}\text{Be}_{26}\text{Cu}_{10}\text{Ni}_6$	35.8 1.8	595	3.7
17	$\text{Ti}_{32.8}\text{Zr}_{30.2}\text{Cu}_9\text{Ni}_{6.3}\text{Be}_{22.7}$	34.4 1.7	581	4.9
18	$\text{Zr}_{35}\text{Hf}_{13}\text{Al}_{11}\text{Ag}_8\text{Ni}_8\text{Cu}_{25}$	32.8 1.9	710	3.8

Таблица 2. Термодинамическая хрупкость $m_{\Delta S}$, рассчитанная по формуле (4), кинетическая хрупкость m_η и хрупкость m_G , рассчитанная из модуля сдвига (данные работ [12, 13]), а также литературные значения кинетической хрупкости m_{lit} . Указаны также энтропии смешения $\Delta S_{\text{mix}}/R$ для исследованных МС

#	$m_{\Delta S}$	m_G	m_η	m_{lit}	$\Delta S_{\text{mix}}/R$
1	29	28	28	30 [34]	1.03
2	29	—	—	46 [34]	1.05
3	46	35	35	—	1.04
4	40	37	38	54 [35]	1.28
5	44	35	32	—	0.93
6	47	32	33	—	0.98
7	79	29	—	38 [36]	1.79
8	37	—	—	—	1.26
9	28	—	—	—	0.97
10	38	—	—	65 [36]	0.99
11	27	—	—	26 [37]	0.99
12	26	—	—	—	0.93
13	37	—	—	—	0.86
14	29	—	—	—	0.83
15	67	—	—	—	1.61
16	76	—	—	—	1.46
17	54	—	—	—	1.45
18	60	—	—	—	1.63

шению к материнскому кристаллу, определяемую соотношением (5).

Важно выяснить зависимость термодинамической фрагильности $m_{\Delta S}$ от энтропии смешения ΔS_{mix} и избыточной энтропии ΔS по отношению к материнскому кристаллу. Соответствующая информация представлена на рис. 5, панель (а) которого

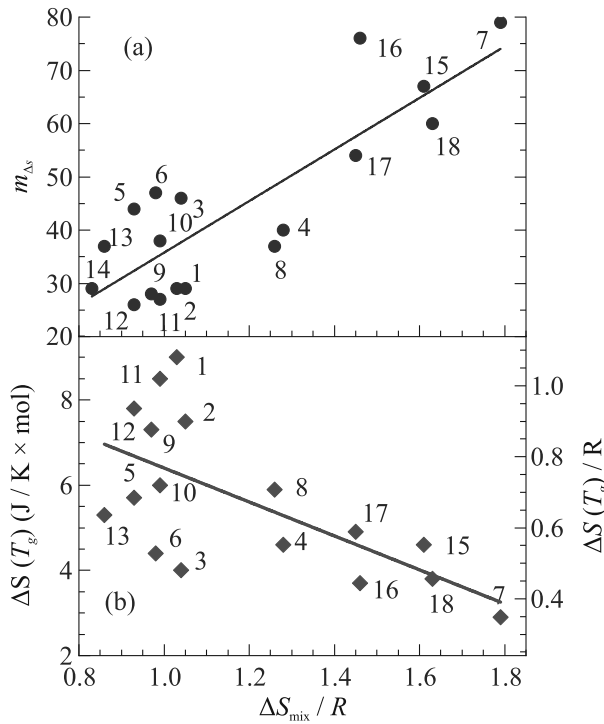


Рис. 5. (Цветной онлайн) Термодинамическая фрагильность $m_{\Delta S}$ (а) и избыточная энтропия $\Delta S(T_g)$ (б) в зависимости от энтропии смешения ΔS_{mix} . Цифрами указаны составы МС в соответствии с табл. 1. Линиями показаны среднеквадратичные аппроксимации

показывает, что $m_{\Delta S}$ весьма существенно растет с увеличением ΔS_{mix} . С другой стороны, рост энтропии смешения вызывает значительное снижение избыточной энтропии $\Delta S(T_g)$ (это видно и на рис. 2). Отсюда следует важный вывод о том, что так называемые “высокоэнтропийные МС” (т.е. МС с высокими значениями ΔS_{mix}) на самом деле являются стеклами с низкой избыточной энтропией ΔS . Поскольку последняя величина прямо отражает степень неупорядоченности МС [20] и, соответственно, их релаксационную способность, можно заключить, что “высокоэнтропийные МС” являются наиболее упорядоченными и наименее склонными к релаксации физических свойств при термообработке. При этом фрагильность снижается с ростом избыточной энтропии и соответствующем увеличением степени структурной неупорядоченности стекла. Эти выводы могут

быть полезными при отборе МС для практических применений.

Закключение. Для 18-ти металлических стекол, энтропия смешения которых меняется в интервале $\Delta S_{\text{mix}}/R = 0.83 \div 1.63$, были измерены тепловые потоки и модули сдвига в зависимости от температуры. С этой помощью рассчитаны температурные зависимости избыточной энтропии ΔS по отношению к материнскому кристаллу и определены термодинамические фрагильности $m_{\Delta S}$ в рамках модели Адама–Гиббса. Показано, что расчет $m_{\Delta S}$ в целом согласуется с литературными данными. Установлено, что фрагильность $m_{\Delta S}$ растет с энтропией смешения S_{mix} , но снижается с избыточной энтропией ΔS . Поскольку последняя величина прямо отражает степень неупорядоченности стекла, так называемые “высокоэнтропийные МС” (т.е. стекла с высокой ΔS_{mix}) являются на самом деле наиболее упорядоченными и наименее склонными к релаксации свойств.

Финансирование работы. Данная работа финансировалась за счет средств гранта Российского научного фонда # 23-12-00162. Никаких дополнительных грантов на проведение или руководство данным конкретным исследованием получено не было.

Конфликт интересов. Авторы Р. А. Кончаков, А. С. Макаров, Г. В. Афонин, В. А. Хоник получили поддержку своего исследования от Российского научного фонда, проект # 23-12-00162. Авторы Ц. Ч. Цзизао, Н. П. Кобелев не получают вознаграждения, так как не являются сотрудниками Воронежского государственного педагогического университета, получившего поддержку Российского научного фонда, проект # 23-12-00162.

1. C. A. Angell, Science **267**, 1924 (1995).
2. S. V. Nemilov, J. Non-Cryst. Solids **353**, 4613 (2007).
3. C. A. Angell, MRS Bulletin **33**, 544 (2008).
4. K. Kawakami, T. Harada, Y. Yoshihashi, E. Yonemochi, K. Terada, and H. Moriyama, JPC B **119**(14), 4873 (2015).
5. H. Tanaka, J. Non-Cryst. Solids, **351**, 678 (2005).
6. V. N. Novikov and A. P. Sokolov, Nature **431**, 961 (2004).
7. T. Watanabe, Y. Benino, and T. Komatsu, J. Non-Cryst. Solids **286**, 141 (2001).
8. H. Kato, T. Wada, M. Hasegawa, J. Saida, A. Inoue, and H. S. Chen, Scr. Mater. **54**, 2023 (2006).
9. E. S. Park, J. H. Na, and D. H. Kim, Appl. Phys. Lett. **91**, 031907 (2007).
10. V. N. Novikov, Phys. Rev. E **106**, 024611 (2022).

11. S. Wei, Z. Evenson, I. Gallino, and R. Busch, *Intermetallics* **55**, 138 (2014).
12. A. S. Makarov, J. C. Qiao, N. P. Kobelev, A. S. Aronin, and V. A. Khonik, *J. Phys.: Condens. Matter* **33**, 275701 (2021).
13. А. С. Макаров, Е. В. Гончарова, Ц. Ч. Цзiao, Н. П. Кобелев, В. А. Хоник, *Письма в ЖЭТФ* **113**, 751 (2021).
14. L.-M. Martinez and C. A. Angell, *Nature* **410**, 663 (2001).
15. S. Sastry, *Nature* **409**, 164 (2001).
16. Y. Zhang, *High-Entropy materials. A Brief Introduction*, Springer Nature Singapore Pte Ltd. (2019).
17. Y. Chen, Z.-W. Dai, and J.-Z. Jiang, *J. Alloys Compd.* **866**, 158852 (2021).
18. H. Ding, H. Luan, H. Bu, H. Xu, and K. Yao, *Materials* **15**, 1669 (2022).
19. H. Luan, K. Li, L. Shi, W. Zhao, H. Bu, P. Gong, and K.-F. Yao, *J. Mater. Sci. Technol.* **161**, 50 (2023).
20. A. S. Makarov, G. V. Afonin, R. A. Konchakov, V. A. Khonik, J. C. Qiao, A. N. Vasiliev, and N. P. Kobelev, *Scr. Mater.* **239**, 15783 (2024).
21. Y. Q. Cheng and E. Ma, *Prog. Mater. Sci.* **56**, 379 (2011).
22. W. H. Wang, *Prog. Mater. Sci.* **57**, 487 (2012).
23. N. A. Mauro, M. Blodgett, M. L. Johnson, A. J. Vogt, and K. F. Kelton, *Nat. Commun.* **5**, 4616 (2014).
24. L.-M. Wang, V. Velikov, and C. A. Angell, *J. Chem. Phys.* **117**, 10184 (2002).
25. S. A. Kube, S. Sohn, R. Ojeda-Mota, T. Evers, W. Polsky, N. Liu, K. Ryan, S. Rinehart, Y. Sun, and J. Schroers, *Nat. Commun.* **13**, 3708 (2022).
26. Н. П. Кобелев, В. А. Хоник, *УФН* **193**, 717 (2023).
27. А. С. Макаров, М. А. Кротова, Г. В. Афонин, Ц. Ч. Цзiao, А. М. Глезер, Н. П. Кобелев, В. А. Хоник, *Письма в ЖЭТФ* **115**, 110 (2022).
28. G. Adam and J. H. Gibbs, *J. Chem. Phys.* **43**, 139 (1965).
29. J. C. Dyre, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 953 (2006).
30. H. L. Smith, C. W. Li, A. Hoff, G. R. Garrett, D. S. Kim, F. C. Yang, M. S. Lucas, T. Swanwood, J. Y. Y. Lin, M. B. Stone, D. L. Abernathy, M. D. Demetriou, and B. Fultz, *Nat. Phys.* **13**, 900 (2017).
31. R. Alvarez-Donado and A. Antonelli, *Phys. Rev. Research* **2**, 013202 (2020).
32. N. Neuber, O. Gross, M. Frey, B. Bochtler, A. Kuball, S. Hechler, I. Gallino, and R. Busch, *Acta Mater.* **220**, 117300 (2021).
33. Y. Kawamura, T. Nakamura, H. Kato, H. Mano, and A. Inoue, *Mater. Sci. Eng. A* **304–306**, 674 (2001).
34. T. Wang, L. Hu, Y. Liu, and X. Hui, *Mater. Sci. Eng. A* **744**, 316 (2019).
35. T. Yamasaki, S. Maeda, Y. Yokoyama, D. Okai, T. Fukami, H. M. Kimura, and A. Inoue, *Mater. Trans.* **46**, 2746 (2005).
36. Y. Tong, J. C. Qiao, J. M. Pelletier, and Y. Yao, *J. Alloys Compd.* **820**, 153119 (2020).
37. S. Li, R. J. Wang, M. X. Pan, D. Q. Zhao, and W. H. Wang, *J. Non-Cryst. Solids* **354**, 1080 (2008).

Визуализация магнитной доменной структуры в монокристаллах FeVO_3 и $\text{Fe}_{0.94}\text{Ga}_{0.06}\text{VO}_3$ методом синхротронной рентгеновской топографии

Н. И. Снегирёв^{+*1)}, А. Г. Куликов⁺, И. С. Любутин⁺, А. Ю. Серегин⁺, С. В. Ягулов[×], М. Б. Стругацкий[×]

⁺ Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова, Курчатовский комплекс кристаллографии и фотоники, Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, 119333 Москва, Россия

^{*} Курчатовский комплекс синхротронно-нейтронных исследований, Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, 123182 Москва, Россия

[×] Физико-технический институт ФГАОУ ВО “Крымский федеральный университет имени В. И. Вернадского”, 295007 Симферополь, Россия

Поступила в редакцию 11 февраля 2024 г.

После переработки 19 февраля 2024 г.

Принята к публикации 19 февраля 2024 г.

Описаны методика и экспериментальная ячейка для рентгенодифракционной диагностики кристаллических материалов в условиях воздействия на них внешних магнитных полей. Показано, что приложение даже слабых магнитных полей (около нескольких эрстед) позволяет существенно уменьшить дифракционный контраст на рентгеновских топограммах монокристаллов FeVO_3 и $\text{Fe}_{0.94}\text{Ga}_{0.06}\text{VO}_3$, связанный с неоднородным распределением магнитоскрипционных деформаций, и тем самым улучшить степень их структурного совершенства. Визуализирована магнитная доменная структура монокристаллов твердых растворов $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x\text{VO}_3$. Установлено, что при небольших концентрациях диамагнитных ионов Ga не происходит существенных изменений конфигурации доменных стенок в кристаллах на основе FeVO_3 .

DOI: 10.31857/S1234567824060089, EDN: SGZFQD

1. Введение. Высокосовершенные монокристаллы на основе бората железа FeVO_3 важны для современных высокотехнологичных научных исследований и весьма перспективны для их практического использования в различных отраслях науки и экспериментальной техники [1, 2].

Такие кристаллы являются уникальным модельным объектом для многочисленных исследований в области физики магнитных явлений [3–5]. Большую практическую значимость имеют также твердые растворы замещения $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x\text{VO}_3$, в которых часть парамагнитных ионов железа изоморфно замещена диамагнитными ионами галлия [6, 7]. Допирование подрешетки железа позволяет варьировать температуру Нееля T_N [8], величину спонтанной намагниченности [9], степень структурной стабильности при воздействии высоких температур [10, 11] и другие параметры кристаллов на основе бората железа, что существенно расширяет области их применения.

Кристалл FeVO_3 является антиферромагнетиком со слабым ферромагнетизмом. Магнитные момен-

ты двух подрешеток железа расположены в слоях, параллельных базисной плоскости (001) кристалла и упорядочены антиферромагнитно [12]. Антисимметричное суперобменное взаимодействие приводит к тому, что магнитные моменты подрешеток железа не строго антипараллельны, а слегка скошены, образуя слабый ферромагнитный момент (эффект Дзялошинского). Его наличие обуславливает процессы перемагничивания в кристаллах FeVO_3 под действием внешнего магнитного поля.

Магнитная доменная структура в кристаллах FeVO_3 имеет следующие особенности [13]. Доменные слои лежат в базисной плоскости (001), при этом главная ось третьего порядка [001] перпендикулярна этой плоскости. Поэтому в силу тригональной симметрии (пр. гр. $R\bar{3}c$) возможные взаимные ориентации векторов намагниченности в доменах составляют 60° , 120° и 180° [14].

Магнитные домены в слоях разделены блоховскими доменными границами. Внутри каждого слоя домены разделяются неелевскими границами, ортогональными базисной плоскости [13]. В блоховских гра-

¹⁾ e-mail: niksnegir@yandex.ru

ницах вектор намагниченности, меняя свое направление, проворачивается в плоскостях $(00l)$ (параллельных базисной плоскости (001)), тогда, как в неелевских границах поворот намагниченности происходит в плоскостях типа $(hk0)$ (т.е. перпендикулярно плоскости (001)).

Наличие магнитной доменной структуры влияет на оптические, структурные, дифракционные и резонансные свойства монокристаллов FeBO_3 .

Конфигурация доменных границ определяется энергией магнитной анизотропии, а также магнито-статической и магнитоупругой энергией [15]. Также на доменную структуру значительно влияет существование механических напряжений, связанных с наличием дефектов в структуре реальных кристаллов.

Ранее доменная структура в кристаллах FeBO_3 экспериментально изучалась с помощью мессбауэровской спектроскопии [14], рентгеновской топографии [16], трехкристальной рентгеновской дифрактометрии [17], а также оптическим интерференционным методом [18] и методом порошковых фигур Биттера [19]. Однако для кристаллов твердых растворов $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x\text{BO}_3$ изучение доменной магнитной структуры не проводилось.

В данной работе описана методика рентгеновской диагностики кристаллических материалов с помощью синхротронного излучения в условиях воздействия на них слабых внешних магнитных полей, и продемонстрировано применение данной методики для изучения эволюции магнитной доменной структуры монокристаллов FeBO_3 и $\text{Fe}_{0.94}\text{Ga}_{0.06}\text{BO}_3$ во внешних магнитных полях.

2. Детали эксперимента. Монокристаллы FeBO_3 и $\text{Fe}_{0.94}\text{Ga}_{0.06}\text{BO}_3$ были синтезированы из раствора в высокотемпературном расплаве по методике, описанной в работах [2, 6]. Кристаллы имели форму почти правильных гексагональных пластин, плоскости которых совпадают с базисной плоскостью (001) . Характерный размер кристалла FeBO_3 в базисной плоскости составляет около 8 мм, а толщина пластины – около 0.1 мм. Размер кристалла $\text{Fe}_{0.94}\text{Ga}_{0.06}\text{BO}_3$ в базисной плоскости – около 5 мм, а толщина – около 0.6 мм.

Предварительно, эти кристаллы были исследованы методами магнитометрии. Детали эксперимента описаны в работе [9]. Установлено, что для кристалла FeBO_3 величина спонтанной намагниченности (M_s) при комнатной температуре составляет $2.255(8)$ Эме/г, а температура перехода из магнитно упорядоченного в парамагнитное состояние (T_N) равна $348(1)$ К. Для кристалла

$\text{Fe}_{0.94}\text{Ga}_{0.06}\text{BO}_3$ эти параметры соответственно равны $M_s = 1.837(3)$ Эме/г и $T_N = 331(1)$ К.

По данным магнитооптических измерений установлено, что во внешних магнитных полях около 40 Э многодоменная магнитная структура кристалла FeBO_3 превращается в однодоменную (происходит монодоменизация) [17].

Фактическое содержание атомов Fe и Ga в кристалле $\text{Fe}_{0.94}\text{Ga}_{0.06}\text{BO}_3$ было определено с помощью рентгенофлуоресцентного анализа на спектрометре EDAX Orbis PC Micro-XRF Analyzer.

Эксперимент по наблюдению рентгеновских топограмм во внешних магнитных полях проведен на станции рентгеновской кристаллографии и физического материаловедения (РКФМ) Курчатовского источника синхротронного излучения (“КИСИ-Курчатов”) [20]. Принципиальная схема эксперимента показана на рис. 1. Использование высокоинтен-

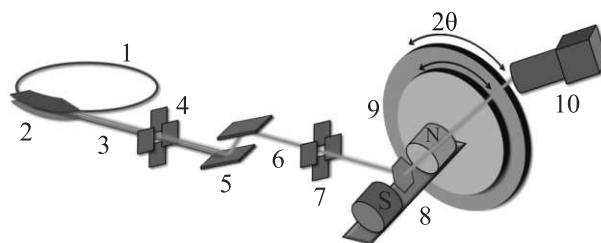


Рис. 1. (Цветной онлайн) Принципиальная схема дифракционного эксперимента. Здесь: 1 – накопительное кольцо источника синхротронного излучения; 2 – поворотный магнит, 3 – “белый” синхротронный пучок; 4 – входная маска (щель) “белого” пучка; 5 – двухкристальный монохроматор Si 111; 6 – монохроматичный рентгеновский пучок с энергией 12 кэВ; 7 – рентгеновские щели; 8 – экспериментальная ячейка с исследуемым кристаллом и электромагнитами (см. ниже); 9 – многокружный гониометр; 10 – двумерный детектор

сивного синхротронного источника с малой, по сравнению с рентгеновской трубкой, расходимостью пучка, позволило добиться высокого разрешения топограмм. Измерения проводились при комнатной температуре (около 298 К).

Для монохроматизации σ -поляризованного синхротронного излучения использовался монохроматор, состоящий из двух горизонтально расположенных плоских кристаллов Si с симметричными отражениями 111. Монохроматор обеспечивал относительную энергетическую расходимость синхротронного пучка $2 \cdot 10^{-4}$. Монохроматор настраивался на энергию 12.000 кэВ, что соответствует наиболее яркой части спектра поворотного магнита.

Исследуемый образец настраивался на рефлекс 300, который соответствует отражению от атомных плоскостей, ортогональных базисной плоскости и содержащих ось (001). Для выбранной длины волны излучения угол Брэгга составляет 22.783° и коэффициент отражения 42 %.

Топограммы записывались в режиме ω -сканирования. Съемка топограмм производилась в геометрии Лауэ, т.е. «на просвет» через кристалл. Использовался двумерный детектор Rigaku LC Micro, который устанавливался под двойным углом Брэгга к исследуемому кристаллу.

Для получения изображений с различной детализацией использовались различные сцинтилляционные объективы к детектору. В частности, на рис. 3 и 4, представлены рентгеновские топограммы, полученные с объективом с эффективным размером пикселя 5.2 мкм. На рисунке 6 показаны топограммы, полученные с объективом с эффективным размером пикселя 1.3 мкм.

Для исследования кристаллов во внешнем магнитном поле была разработана и изготовлена экспериментальная ячейка (рис. 2), совместимая с мно-

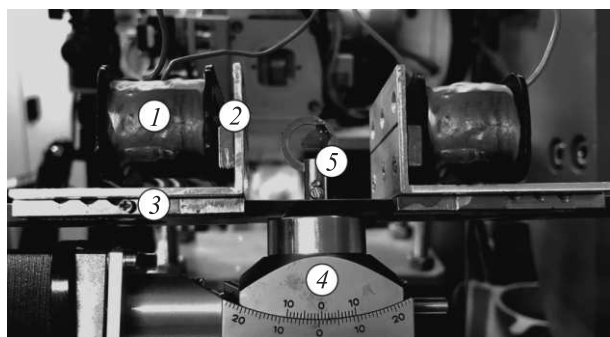


Рис. 2. (Цветной онлайн) Экспериментальная ячейка для исследования кристаллов во внешнем магнитном поле. Здесь: 1 – электромагнитные катушки; 2 – магнитопровод; 3 – направляющая с возможностью регулировки расстояния между электромагнитными катушками; 4 – гониометрическая головка; 5 – исследуемый монокристалл

гокружным гониометром Huber, установленным на экспериментальной станции РКФМ. Для создания однородного магнитного поля на месте расположения образца использовалась пара электромагнитных катушек. Ток на катушки подавался от источника тока GW Instek GPS-3030. Величина внешнего магнитного поля регулировалась путем подачи на катушки различного напряжения и контролировалась датчиком Холла PCE-MFM 3000. Однородность поля в пределах расположения кристалла была не хуже $\pm 10\%$. Чтобы исключить влияние магнитного поля

на прецизионные шаговые двигатели и другие чувствительные устройства, в ячейке применен магнитопровод (рис. 2).

3. Экспериментальные результаты. Известно, что в кристаллах FeVO_3 магнитоупругое взаимодействие проявляется чрезвычайно сильно [21]. Существование магнитострикционных деформаций приводит к небольшому искажению кристаллической структуры бората железа. В пределах магнитного домена магнитострикция одинакова, так как существует единственное направление вектора намагниченности. Однако в соседних доменах магнитострикция неодинакова, а в доменной стенке, где происходит разворот вектора намагниченности, неоднородна. Неоднородное распределение магнитострикционных деформаций в кристалле вызывает структурные искажения, и это делает возможным визуализацию доменной структуры с помощью рентгеновской топографии.

На рисунке 3 представлены рентгеновские топограммы монокристалла FeVO_3 , полученные для рефлекса 300, как без приложения внешнего магнитного поля, так и в магнитном поле напряженностью 14 и 40 Э. Наличие дифракционного контраста указывает на существование в кристалле механических напряжений. При приложении к кристаллу внешнего магнитного поля часть контрастных областей на топограмме исчезает.

На рисунках 3b и c видно, что с увеличением напряженности внешнего магнитного поля доменная граница трансформируется, а затем исчезает. Во внешнем магнитном поле 40 Э и более дифракционный контраст перестает изменяться. Это указывает на то, что магнитная структура из многодоменной переходит в однодоменное состояние, и магнитострикционная деформация становится однородной по всему кристаллу. При этом на топограмме намагниченного кристалла (т.е. в отсутствие неоднородной магнитострикционной деформации) остаются только изображения статических дефектов и несовершенств кристаллической структуры.

Нами установлено, что такие изменения являются обратимыми. После отключения внешнего магнитного поля на топограммах вновь появляются контрастные области, однако их конфигурация не полностью совпадает с изначальной (см. для сравнения рис. 3d и a).

Установлено, что на рентгеновской топограмме монокристалла $\text{Fe}_{0.94}\text{Ga}_{0.06}\text{VO}_3$ так же, как и на топограмме кристалла FeVO_3 , присутствуют контрастные области, указывающие на наличие магнитной доменной структуры (рис. 4). При воздействии внеш-

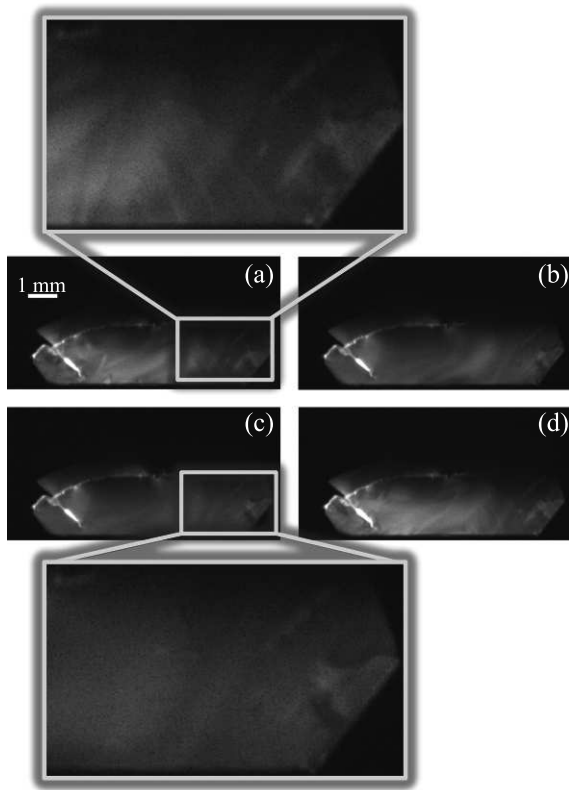


Рис. 3. Рентгеновские топограммы монокристалла FeVO_3 , полученные для рефлекса 300 без приложения внешнего магнитного поля (а), во внешнем магнитном поле 14 Э (б) и 40 Э (с), а также после отключения внешнего магнитного поля (д). На выносках показаны увеличенные фрагменты топограмм

него магнитного поля часть этих областей, связанных с наличием доменных стенок, трансформируется, а затем исчезает (рис. 4а–д). Конфигурация доменных стенок в кристалле $\text{Fe}_{0.94}\text{Ga}_{0.06}\text{VO}_3$ аналогична таковой в FeVO_3 . Это позволяет сделать качественный вывод о том, что магнитная доменная структура в кристаллах на основе бората железа не претерпевает выраженных изменений при допировании кристаллов диамагнитными атомами галлия, по крайней мере, при малой концентрации Ga.

4. Обсуждение результатов. Как отмечено выше, дифракционный контраст возникает из-за неоднородных магнитострикционных деформаций. Наблюдаемая визуализация доменной структуры обусловлена магнитострикционными искажениями кристаллической решетки, которые в общем различны как в разных доменах, так и в доменных границах. Обсудим эти искажения более подробно.

Статические магнитострикционные деформации u_{ij}^0 тригональных легкплоскостных слабоферромаг-

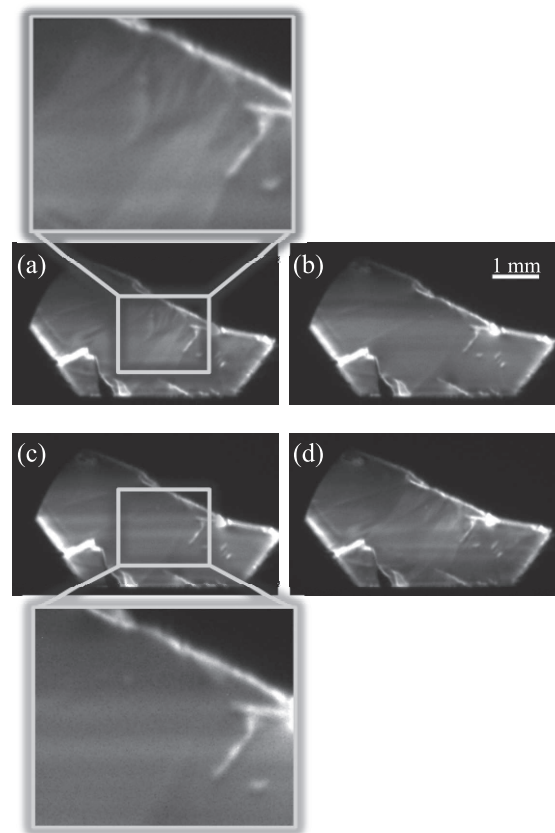


Рис. 4. Рентгеновские топограммы монокристалла $\text{Fe}_{0.94}\text{Ga}_{0.06}\text{VO}_3$, полученные для рефлекса 300 без приложения внешнего магнитного поля (а), во внешнем магнитном поле 14 Э (д) и 40 Э (с), а также после отключения внешнего магнитного поля (д). На вставках показаны увеличенные фрагменты топограмм

нитных кристаллов, к которым принадлежит борат железа, определяются из условия минимума равновесной части термодинамического потенциала, содержащего упругий F_e и магнитоупругий F_{me} вклады [13, 22]:

$$\frac{\partial(F_e + F_{me})}{\partial u_{ij}^0} = 0, \quad (1)$$

$$F_e = \frac{1}{2}C_{11}(u_{xx}^{02} + u_{yy}^{02}) + 2C_{66}u_{xy}^{02} + C_{12}u_{xx}^0u_{yy}^0 + \\ + 2C_{44}(u_{xz}^{02} + u_{yz}^{02}) + 2C_{14}[(u_{xx}^0 - u_{yy}^0)u_{yz} + 2u_{xy}^0u_{xz}^0] + \\ + C_{13}(u_{xx}^0 + u_{yy}^0)u_{zz}^0 + \frac{1}{2}C_{33}u_{zz}^{02}. \quad (2)$$

$$F_{me} = \frac{1}{2}(B_{11} + B_{12})(u_{xx}^0 + u_{yy}^0) + \\ + \frac{1}{2}B_{66}[2u_{xy}^0 \sin 2\beta - (u_{xx}^0 - u_{yy}^0) \cos 2\beta] + \\ + 2B_{14}(u_{xz}^0 \sin 2\beta - u_{yz}^0 \cos 2\beta) + B_{13}u_{zz}^0. \quad (3)$$

Здесь u_{ij}^0 – компоненты тензора статических магнитострикционных деформаций; C_{ij} и B_{ij} – упругие и магнитоупругие постоянные, соответственно; β – угол между вектором намагниченности $\mathbf{m}$ и осью $[010]$, лежащими в базисной плоскости (001) . Отметим, что в выражении (3) в качестве множителей должны быть квадраты приведенного вектора антиферромагнетизма l . Однако, ввиду очень слабого сдвига магнитных подрешеток в борате железа, $l \approx 1$.

Решение уравнений (1) приводит к выражениям:

$$\begin{cases} u_{xx}^0 - u_{yy}^0 = \frac{2C_{14}B_{14} - C_{44}B_{66}}{2(C_{14}^2 - C_{44}C_{66})} \cos 2\beta, \\ u_{xy}^0 = -\frac{2C_{14}B_{14} - C_{44}B_{66}}{4(C_{14}^2 - C_{44}C_{66})} \sin 2\beta, \\ u_{xz}^0 = \frac{2C_{66}B_{14} - C_{14}B_{66}}{4(C_{14}^2 - C_{44}C_{66})} \sin 2\beta, \\ u_{yz}^0 = -\frac{2C_{66}B_{14} - C_{14}B_{66}}{4(C_{14}^2 - C_{44}C_{66})} \cos 2\beta, \\ u_{xx}^0 + u_{yy}^0 = \frac{2C_{13}B_{13} - C_{33}(B_{11} + B_{12})}{C_{33}(C_{11} + C_{12}) - 2C_{13}^2}, \\ u_{zz}^0 = \frac{C_{13}(B_{11} + B_{12}) - (C_{11} + C_{12})B_{13}}{C_{33}(C_{11} + C_{12}) - 2C_{13}^2}. \end{cases} \quad (4)$$

Из (4) следует, что от ориентации намагниченности не зависит только продольная деформация u_{zz}^0 .

В настоящей работе рентгеновские топограммы были получены для рефлекса (300) , который соответствует отражению от атомных плоскостей, ортогональных базисной плоскости и содержащих ось (001) . Эта геометрия наиболее благоприятна для наблюдения дифракционного контраста, поскольку в этом случае различия в изменении расстояний между отражающими атомными плоскостями для разных доменов (различные углы β) наиболее существенны.

В выражениях (4) фигурирует удвоенный угол 2β , следовательно, функции, определяющие компоненты тензора магнитострикционных деформаций в базисной плоскости, периодичны с периодом π . Это означает, что разворот вектора намагниченности на 180 градусов не может изменить конфигурации магнитострикционных деформаций. Поэтому для 180-градусных доменов контраст не должен наблюдаться. По-видимому, 180-градусные домены мы наблюдаем на рис. 3а, где контраст проявляется очень слабо. Здесь очертания доменов возникают только за счет визуализации доменных границ, в которых магнитный вектор плавно разворачивается от ориентации в одном домене к ориентации в соседнем. При

этом возникает контраст между границей и примыкающими доменами.

На рисунке 5 схематически проиллюстрированы два предельных случая, когда доменная граница разделяет не-180-градусные (а) и 180-градусные (б) домены. В первом случае дифракционный контраст наблюдается в соседних доменах, а во втором случае – только в доменной стенке.

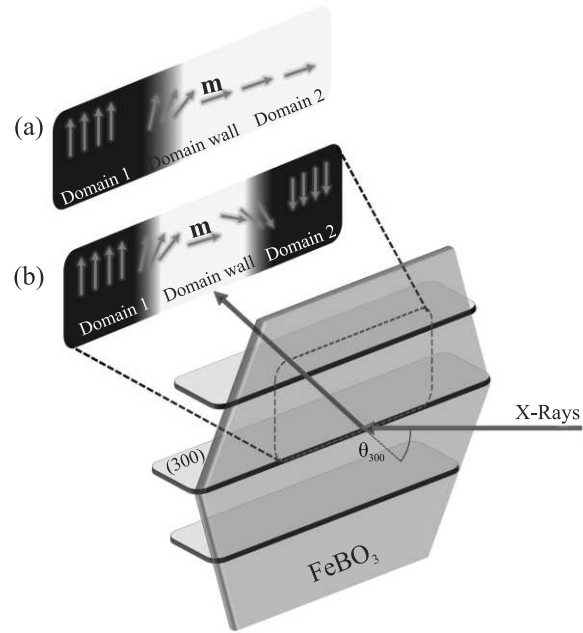


Рис. 5. (Цветной онлайн) Геометрия эксперимента. Показано взаимное расположение падающего синхротронного пучка, отражающих плоскостей образца (300) и векторов намагниченности в доменах $\mathbf{m}_i$. Проиллюстрированы два предельных случая, когда доменная граница разделяет не-180-градусные (а) и 180-градусные (б) домены. В первом случае дифракционный контраст наблюдается в соседних доменах, во втором случае – только в доменной стенке

Топограммы, показанные на рис. 4 и 6, демонстрируют домены, взаимная ориентация намагниченностей в которых отличается от 180-градусной. Такие домены “подсвечены” с разной интенсивностью, что приводит к наблюдаемому контрасту.

5. Заключение. На основе предложенной методики и с помощью сконструированной экспериментальной ячейки на станции РКФМ Курчатовского источника синхротронного излучения реализована методика рентгенодифракционной диагностики кристаллических материалов в условиях воздействия на них внешних магнитных полей.

Метод рентгеновской топографии позволил визуализировать магнитную доменную структуру моно-

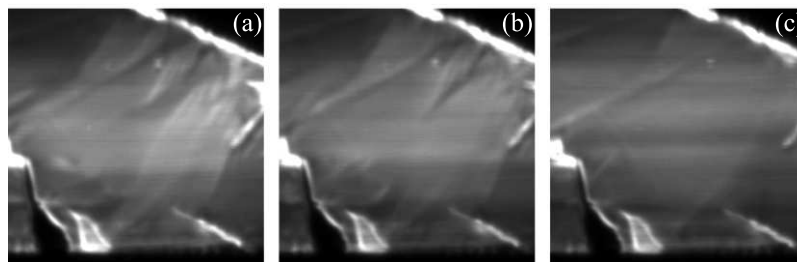


Рис. 6. Рентгеновские топограммы монокристалла $\text{Fe}_{0.94}\text{Ga}_{0.06}\text{BO}_3$, полученные для рефлекса 300 без приложения внешнего магнитного поля (а), во внешнем магнитном поле ~ 1 Т (b) и ~ 2 Т (c)

кристаллов твердых растворов $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x\text{BO}_3$ ($x = 0$, $x = 0.06$) и провести анализ ее трансформации под действием магнитного поля.

Установлено, что при допировании кристалла FeBO_3 ионами Ga в малой концентрации, эволюция магнитной доменной структуры кристаллов во внешних магнитных полях не претерпевает существенных изменений. Показано, что даже в слабых внешних магнитных полях (существенно меньше полей монокристаллизации) дифракционный контраст в области доменной стенки исчезает, что улучшает степень структурного совершенства кристаллов $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x\text{BO}_3$ и их дифракционные параметры. Полученные результаты могут быть полезны при применении кристаллов на основе бората железа в различных отраслях науки и техники.

Авторы признательны В. А. Шишкову (НИЦ «Курчатовский институт») за помощь в изготовлении экспериментальной ячейки.

Финансирование работы. Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт» в части подготовки экспериментальных образцов, РФЛА, магнитных измерений и анализа эффектов магнитострикционных деформаций кристаллов.

Разработка рентгеновской методики анализа эволюции магнитной доменной структуры с использованием источника синхротронного излучения выполнена в рамках гранта Минобрнауки РФ # 075-15-2021-1362.

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

1. С. Г. Овчинников, В. В. Руденко, Н. В. Казак, И. С. Эдельман, В. А. Гавричков, *ЖЭТФ* **158**, 184 (2020).
2. S. Yagupov, M. Strugatsky, K. Seleznyova, Y. Mogilenec, N. Snegirev, N. V. Marchenkov, A. G. Kulikov, Y. A. Eliovich, K. V. Frolov, Y. L. Ogarkova, and I. S. Lyubutin, *Cryst. Growth Des.* **18**, 7435 (2018).

3. V. E. Dmitrienko, E. N. Ovchinnikova, S. P. Collins, G. Nisbet, G. Beutier, Y. O. Kvashnin, V. V. Mazurenko, A. I. Lichtenstein, and M. I. Katsnelson, *Nat. Phys.* **10**, 202 (2014).
4. I. S. Lyubutin, N. I. Snegirev, M. A. Chuev, S. S. Starchikov, E. S. Smirnova, M. V. Lyubutina, S. V. Yagupov, M. B. Strugatsky, O. A. Alekseeva, *J. Alloys Compd.* **906**, 164348 (2022).
5. V. E. Zubov, A. D. Kudakov, D. A. Bulatov, D. A. Bulatov, M. B. Strugatskii, and S. V. Yagupov, *JETP Lett.* **116**, 394 (2022).
6. E. S. Smirnova, N. I. Snegirev, I. S. Lyubutin, S. S. Starchikov, V. V. Artemov, M. V. Lyubutina, S. V. Yagupov, M. B. Strugatsky, Y. A. Mogilenec, K. A. Seleznyova, and O. A. Alekseeva, *Acta Crystallogr. Sect. B Struct. Sci. Cryst. Eng. Mater.* **76**, 1100 (2020).
7. N. Snegirev, I. Lyubutin, A. Kulikov, D. Zolotov, A. Vasiliev, M. Lyubutina, S. Yagupov, Y. Mogilenec, K. Seleznyova, and M. Strugatsky, *J. Alloys Compd.* **889**, 161702 (2021).
8. N. I. Snegirev, S. S. Starchikov, I. S. Lyubutin, M. A. Chuev, S. V. Yagupov, and M. B. Strugatskii, *Phys. Met. Metallogr.* **124**, 349 (2023).
9. N. I. Snegirev, A. V. Bogach, I. S. Lyubutin, M. A. Chuev, S. V. Yagupov, Yu. A. Mogilenec, K. A. Selezneva, and M. B. Strugatsky, *Phys. Met. Metallogr.* **124**, 133 (2023).
10. N. I. Snegirev, I. S. Lyubutin, A. G. Kulikov, S. V. Yagupov, K. A. Seleznyova, Yu. A. Mogilenec, and M. B. Strugatsky, *Crystallogr. Reports* **65**, 596 (2020).
11. N. I. Snegirev, I. S. Lyubutin, S. V. Yagupov, A. G. Kulikov, V. V. Artemov, Yu. A. Mogilenec, and M. B. Strugatsky, *JETP Lett.* **112**, 352 (2020).
12. M. Pernet, D. Elmale, and J. C. Joubert, *Solid State Commun.* **8**, 1583 (1970).
13. M. Strugatsky, *Isometric Iron Borate Single Crystals: Magnetic and Magnetoacoustic Effects*, ТНУ им. В. И. Вернадского, Симферополь (2008).
14. N. I. Snegirev, M. A. Chuev, I. S. Lyubutin, S. S. Starchikov, S. V. Yagupov, and M. B. Strugatsky, *JETP Lett.* **117**, 769 (2023).
15. J. A. Eaton and A. H. Morrish, *Can. J. Phys.* **49**, 2768 (1971).

16. V. A. Labushkin, V. G. Lomov, A. A. Faleev, and V. A. Figin, *Fiz. Tverd. Tela* **22**, 1725 (1980).
17. N. Snegirev, A. Kulikov, I. S. Lyubutin, S. Yagupov, M. Lyubutina, and M. Strugatsky, *Cryst. Growth Des.* **23**, 5883 (2023).
18. J. Haisma and W. T. Stacy, *J. Appl. Phys.* **44**, 3367 (1973).
19. А. Р. Прокопов, В. Н. Селезнев, М. Б. Стругацкий, С. В. Ягупов, *Журнал технической физики* **10**, 2051 (1987).
20. V. G. Kohn, A. G. Kulikov, P. A. Prosekov, A. Y. Seregin, A. V. Targonsky, Y. A. Eliovich, Y. V. Pisarevsky, A. E. Blagov, and M. V. Kovalchuk, *J. Synchrotron Radiat.* **27**, 378 (2020).
21. M. H. Seavey, *Solid State Commun.* **10**, 219 (1972).
22. K. Seleznyova, E. Smirnova, M. Strugatsky, N. Snegirev, S. Yagupov, Yu. Mogilenec, E. Maksimova, O. Alekseeva, and I. Lyubutin, *J. Magn. Magn. Mater.* **560**, 169658 (2022).

Вариационная квантовая оптимизация открытого карьера

Г. Парадеженко¹⁾, А. Первишко, Д. Юдин

Сколковский институт науки и технологий, 121205 Москва, Россия

Поступила в редакцию 29 декабря 2023

После переработки 15 февраля 2024

Принята к публикации 22 февраля 2024

С учетом последних достижений в области создания многокубитных квантовых систем все более широко обсуждается возможность использования квантовых компьютеров для решения задач комбинаторной оптимизации. В данной работе рассматривается применимость вероятностного алгоритма оптимизации на основе тензорных поездов в вариационных квантовых алгоритмах для решения задачи о разработке открытого месторождения. Предложенная методология сравнивается с традиционными подходами, для которых, как правило, характерны проблема исчезающе малых градиентов с ростом размерности задачи, а также чувствительность к наличию многих локальных минимумов. Показано, что предложенный подход, основанный на использовании вероятностного метода тензорной оптимизации, позволяет достаточно точно определять оптимум рассматриваемой задачи.

DOI: 10.31857/S1234567824060090, EDN: SKGVVO

Введение. Вариационные квантовые алгоритмы (*variational quantum algorithms*, VQAs) в настоящее время считаются наиболее перспективным направлением реализации квантовых вычислений с использованием зашумленных квантовых устройств промежуточного масштабирования (*noisy intermediate-scale quantum*, NISQ) [1]. В отличие от классической модели вычислений, где входная битовая строка преобразуется в выходную битовую строку за счет применения конечного числа классических вентилей, выбранных из универсального набора, в случае квантовых вычислений существуют хоть эквивалентные, но все-таки различные, гейтовая модель вычислений [2], квантовые вычисления на основе измерений [3, 4] и адиабатические квантовые вычисления [5, 6]. В то время как гейтовая модель является ближайшим аналогом классической модели и представляет собой стандартный подход к реализации универсальных квантовых вычислений, адиабатические квантовые вычисления лежат в основе алгоритмов квантовой оптимизации [5]. Вариационные квантовые вычисления родились на стыке гейтовой и модели адиабатических квантовых вычислений [7, 8]. Значительный прогресс последних лет в области экспериментальной реализации многокубитных квантовых систем позволил на практике продемонстрировать возможность использования вариационных квантовых алгоритмов для решения ряда простейших задач комбинаторной оптимизации [9–12]. Тем не менее, более широкому использованию

зашумленных квантовых устройств промежуточного масштабирования препятствуют шумы, неизбежно присутствующие в квантовых вентилях и ограничивающие глубину используемых квантовых цепей, определяющую количество операций, которые можно выполнить с заданным набором кубитов.

В вариационной модели квантовых вычислений [13–15] квантовый процессор используется для приготовления семейства пробных анзац-состояний, задаваемых параметризованной квантовой схемой, параметры которой определяются исходя из условия минимизации целевой функции, полученной на выходе квантовой цепи, с помощью классического компьютера, а затем передаются обратно квантовому компьютеру. Говоря о практических приложениях, вариационные квантовые алгоритмы могут найти применение в квантовой химии [16], физике твердого тела [17, 18], квантовом машинном обучении [19, 20] и многих других областях (см. обзор [21]). Стоит отметить, что вариационные квантовые алгоритмы хорошо подходят для решения задач комбинаторной оптимизации, которые можно свести к задаче поиска основного состояния системы, определяемой некоторым гамильтонианом [14]. В то время как задачи о максимальном разрезе графа [22–25] и максимальном независимом наборе [10], задача коммивояжера [26, 27], задача маршрутизации транспорта [28] являются наиболее известными примерами использования данного подхода, в этой статье мы рассмотрим индустриально значимую задачу, связанную с определением оптимального предельного контура открытого карьера [29, 30].

¹⁾e-mail: g.paradezhenko@skoltech.ru

Задача о выборе стратегии оптимальной разработки открытого месторождения может быть записана через посредство блочной модели стоимости, включающей набор правильных прямоугольных блоков, полностью заполняющих рассматриваемое пространство добычи полезных ископаемых и характеризующих соответствующей прибылью от их извлечения [30]. Извлечение каждого такого блока может быть представлено в виде оптимизационной задачи для максимизации общей прибыли с учетом ограничений, налагаемых геологическими и горнотехническими особенностями системы. При такой форме записи в рамках классического подхода представленная задача сводится к задаче о максимальном замыкании ориентированного графа или задаче максимального потока, которые могут быть решены с использованием доступных графовых алгоритмов. На протяжении достаточно продолжительного времени подобные задачи традиционно решались с помощью хорошо известного в теории графов алгоритма Лерча–Гроссмана, являющегося эталонным методом в горнодобывающей промышленности, который гарантирует решение задачи нахождения оптимального контура открытого карьера за полиномиальное время [29, 31, 32]. Впоследствии был также предложен более эффективный алгоритм псевдопотока (*pseudoflow*) [33]. В рамках квантового подхода решение данной проблемы может быть предложено в рамках использования тензорных сетей, что подробно обсуждается в работе [34]. Данная методология позволяет моделировать задачу разработки месторождения открытым способом с помощью тензорной сети, построенной таким образом, что ее структура непосредственно учитывает ограничения, связанные с профилем карьера. В свою очередь, в работе [36] была впервые показана возможность использования вариационных квантовых алгоритмов в задаче оптимальной разработки двумерного (плоского) открытого карьера в логике вариационного квантового алгоритма поиска собственного состояния эрмитовой матрицы (*variational quantum eigenolver*, VQE) [35].

Основные преимущества вариационных квантовых алгоритмов связаны с их устойчивостью к шумам и возможностью использования относительно неглубоких квантовых схем, однако их эффективность в значительной степени определяется выбором вариационного анзац-состояния. В свою очередь, оптимизируемая целевая функция является, как правило, сильно невыпуклой с множеством локальных минимумов, что при оптимизации параметризованной квантовой схемы приводит к проблеме исчезающе малых градиентов целевой функции [37]. Вы-

бор подходящей стратегии оптимизации по-прежнему представляет собой актуальную задачу, поскольку в рамках классических подходов на основе градиентных методов оптимизации вероятность возникновения данной проблемы достаточно высока [38], однако даже использование неградиентных методов не гарантирует достижения глобального минимума целевой функции [39]. Отдельно стоит отметить, что результат решения оптимизационной задачи в значительной степени связан с выбором начального приближения для вариационных параметров. С целью обойти данное ограничение был предложен целый ряд эвристик [23, 40–42], но такого рода эвристики по-прежнему не гарантируют достижения оптимума [23]. Это в совокупности делает разработку эффективного универсального метода оптимизации параметризованных квантовых схем ключевым вопросом, ответ на который позволит перейти к решению практических задач с использованием вариационных квантовых алгоритмов.

В данной работе мы рассматриваем альтернативный подход, основанный на вероятностном методе тензорной оптимизации [43]. В этом случае целевая функция задается многомерным тензором, глобальный минимум которого вычисляется в рамках дискретной оптимизации с использованием полностью вероятностного подхода. Мы исследуем применимость данного метода и покажем его эффективность при оптимизации параметризованной квантовой схемы на примере задачи оптимальной разработки двумерного и трехмерного открытых карьеров в логике вариационного квантового алгоритма VQE. В частности, мы продемонстрируем, что конечный результат, полученный при использовании предложенной методологии, не зависит от выбора начальных значений вариационных параметров.

Задача определения оптимального контура открытого карьера. В общем случае задача открытой разработки месторождения может быть представлена с помощью пространственной сетки из n связанных элементов или блоков, задаваемых своими координатами. Для каждого блока считается известной прибыль от его извлечения $w_i \in \mathbb{R}$. В силу особенностей разработки карьера необходимо принимать во внимание тот факт, что, если извлечен некоторый i -й блок, то все блоки, лежащие поверх него, также должны быть извлечены. Здесь и далее будем называть эти блоки дочерними для i -го блока и обозначать как $j \in P_i$. Другими словами, данную модель можно представить в виде ориентированного графа $G = (V, E)$, вершины которого $i \in V$ соответствуют i -м блокам карьера и имеют веса w_i , а направленные

ребра $(i, j) \in E$ обозначают связь i -го блока с его дочерними блоками $j \in P_i$ (см. рис. 1). Тогда исходную задачу можно сформулировать в логике задачи о максимальном замыкании графа. В используемых обозначениях, замыканием графа $G = (V, E)$ называется такое подмножество $V' \subset V$, что от вершин $i \in V'$ к вершинам $j \in V/V'$ не отходит ни одно ребро $(i, j) \in E$. Максимальное замыкание графа – это замыкание $V' \subset V$, при котором $\sum_{i \in V'} w_i$ достигает максимума.

Формально задача максимизации прибыли в процессе разработки открытого месторождения может быть сведена к задаче бинарного программирования. Для этого сопоставим булеву переменную $\sigma_i = \{0, 1\}$ каждой вершине так, чтобы $\sigma_i = 1$ (0) в случае, если i -ый блок извлечен (неизвлечен). Тогда задача определения предельного контура карьера состоит в поиске такого булева вектора $\sigma = (\sigma_1, \dots, \sigma_n)$, который максимизирует общую прибыль с учетом ограничений:

$$C(\sigma) = \sum_{i=1}^n w_i \sigma_i \rightarrow \max_{\sigma \in \{0,1\}^n}, \quad (1)$$

$$S(\sigma) = \sum_{i=1}^n \sum_{j \in P_i} \sigma_i (1 - \sigma_j) = 0. \quad (2)$$

Как можно заметить, условие (1) направлено на максимизацию прибыли, а выражение (2) учитывает естественное ограничение на извлечение i -го блока: если $\sigma_i = 1$, то для всех его дочерних блоков $j \in P_i$ справедливо $\sigma_j = 1$. Заметим, что выражения (1)–(2) можно переформулировать в терминах задачи неограниченной бинарной оптимизации путем добавления штрафного слагаемого к целевой функции,

$$L(\sigma) = C(\sigma) - \gamma S(\sigma) \rightarrow \max_{\sigma \in \{0,1\}^n}, \quad (3)$$

где $\gamma > 0$ – штрафной коэффициент.

Теперь задача оптимизации (1)–(3) естественным образом сводится к задаче отыскания основного состояния квантового гамильтониана. Поставим каждой вершине $i \in V$ графа в соответствие кубит, а булеву вектору $\sigma = (\sigma_1, \dots, \sigma_n)$ – состояние $|\sigma\rangle = \otimes_{i=1}^n |\sigma_i\rangle$. Используя подстановку $\sigma_i \mapsto (1 - Z_i)/2$, запишем выражения (1) и (2) в виде

$$H_C = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n w_i (1 - Z_i), \quad (4)$$

$$H_S = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^n \sum_{j \in P_i} (1 - Z_i)(1 + Z_j). \quad (5)$$

Теперь задача сводится к поиску основного состояния $|\sigma\rangle$ гамильтониана $-H_C$ при условии, что оно

принадлежит ядру оператора H_S , т.е. $H_S |\sigma\rangle = 0$. Аналогично (3) она может быть записана как задача неограниченной оптимизации за счет добавления штрафного слагаемого. Соответственно задача сводится к поиску основного состояния гамильтониана $H = -H_C + \gamma H_S$.

Как было упомянуто выше, геометрия открытого карьера вообще говоря может быть определена с использованием направленного графа. Для того, чтобы сделать наше рассмотрение как можно более общим, рассмотрим как двумерную, так и трехмерную реализации, показанные на рис. 1. В первом случае граф строится таким образом, что i -й блок соединяется с тремя дочерними блоками $j \in P_i$, координаты которых $(x_i \pm 1, y_i + 1)$ и $(x_i, y_i + 1)$. На рисунке 1a рассматривается сценарий, моделирующий распространенную ситуацию в горнодобывающей промышленности, которая заключается в исследовании экономической эффективности извлечения экономически нерентабельных блоков при разработке верхних слоев для достижения высокомаржинального блока, расположенного на глубине карьера. На рисунке 1b, в свою очередь, показан более общий случай двумерной задачи. При описании трехмерной геометрии необходимо построить модель, в которой i -й блок связан с четырьмя дочерними блоками $j \in P_i$, координаты которых $(x_i \pm 1, y_i - 1, z_i + 1)$ и $(x_i \pm 1, y_i + 1, z_i + 1)$ (см. рис. 1c). Отметим, что для дальнейшего исследования мы выбираем общее число вершин графа (соответствующих кубитам) так, чтобы численное решение задачи с использованием квантового алгоритма на классическом компьютере могло быть проведено в разумное время. Как мы обнаружили, для числа кубитов $n \geq 14$ эти расчеты становятся чрезвычайно времязатратными.

В качестве штрафного коэффициента γ в выражении (3) используем [36],

$$\gamma = \max_i \left(w_i - \sum_{j \in P_i} w_j \right) / p, \quad (6)$$

где p – число дочерних блоков $j \in P_i$. Очевидно, что $p = 3$ и 4 для двумерной и трехмерной моделей, соответственно.

Вариационный квантовый алгоритм поиска собственного состояния эрмитовой матрицы. В задачах комбинаторной оптимизации, например, о максимальном разрезе графа или вершинном покрытии, наиболее естественным выглядит использование вариационного квантового алгоритма приближенной оптимизации (QAOA) [14]. Однако, в рамках QAOA целевая функция исследуемой задачи (1) предпола-

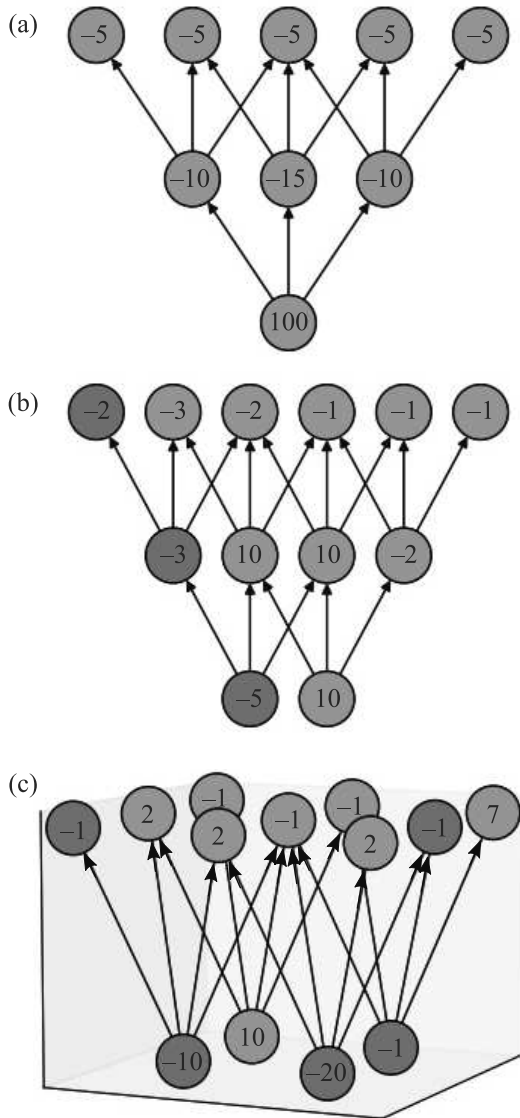


Рис. 1. (Цветной онлайн) Блочные модели открытого карьера в виде ориентированных графов $G = (V, E)$ с вершинами $i \in V$, представляющими блоки горной породы, прибыль от извлечения которых определяется w_i , а ребра $(i, j) \in E$ связывают i -й блок с его дочерними блоками $j \in P_i$. Для оптимальных решений зеленым (красным) цветом отмечены вершины, соответствующие извлекаемым (неизвлекаемым) блокам. (a) – Двумерная модель задачи о разработке месторождений открытым способом, когда максимальная прибыль $C(\sigma^*) = 40$ достигается при извлечении экономически нерентабельных блоков в верхних слоях, являющихся дочерними к высокомаржинальному блоку, расположенному на глубине карьера. (b) – Обобщенная двумерная модель открытого карьера для которой максимальная прибыль соответствует $C(\sigma^*) = 20$. (c) – Трехмерная модель открытого карьера с максимальной прибылью $C(\sigma^*) = 20$

гается неотрицательной [23]. Поскольку значения весов w_i в уравнении (1) могут быть отрицательными, целевая функция $C(\sigma)$ задачи разработки открытого месторождения может также принимать отрицательные значения. Следуя таким образом [36], для решения поставленной задачи мы предлагаем вместо этого использовать вариационный квантовый алгоритм поиска основного состояния эрмитовой матрицы (VQE) [35]. VQE – это квантово-классический гибридный алгоритм поиска основного состояния взаимодействующей квантовой системы. Для запуска алгоритма необходимо задать гамильтониан H системы кубитов, который нужно минимизировать, вариационное анзац-состояние, определяемое унитарным оператором $U(\theta)$, параметризованным $\theta \in \mathbb{R}^d$, где d – количество параметров, некоторое легко подготавливаемое начальное квантовое состояние $|\psi_0\rangle$ и выбрать классический оптимизатор. Квантовый процессор (или его симулятор) готовит семейство пробных состояний $|\psi(\theta)\rangle = U(\theta)|\psi_0\rangle$ и оценивает математическое ожидание заданного гамильтониана, $E(\theta) = \langle\psi(\theta)|H|\psi(\theta)\rangle$, что позволяет, в свою очередь, ввести в рассмотрение многопараметрическую целевую функцию $E(\theta)$. Оптимальные значения вариационных параметров пробного состояния $|\psi(\theta)\rangle$, аппроксимирующего основное состояние H , находятся из условия минимизации $E(\theta)$:

$$\theta_* = \arg \min_{\theta \in \Omega} E(\theta), \quad (7)$$

где Ω – компакт вариационных параметров θ , зависящий от выбора конкретного анзаца $U(\theta)$.

На практике реализация алгоритма VQE состоит из нескольких ключевых шагов. Во-первых, нам нужно выбрать подходящую параметризованную квантовую схему, определяемую унитарным оператором $U(\theta)$, иными словами, анзац-состояние $|\psi(\theta)\rangle$. Как правило, для этих целей используют аппаратно-эффективный анзац (НЕА), но иногда также удается построить состояние, соответствующее специфике задачи. В общем случае, НЕА включает в себя набор параметризованных одно- и двухкубитных вентилях, которые могут быть непосредственно реализованы с использованием квантовых систем промежуточного масштабирования [44]. Однако, стоит отметить спорность его выразительности [45], а также необходимость использования экспоненциального количества параметров относительно количества кубитов n [46]. С другой стороны, выбор анзаца, продиктованного спецификой рассматриваемой задачи, может быть эффективным с точки зрения количества вариационных параметров, обес-

печивающих систематическое приближение к основному состоянию H . К ним можно отнести вариационный связанный кластер [47], анзац-схемы малой глубины [48], гамильтонов вариационный анзац [49].

В задаче разработки открытого месторождения (4)–(5) будем использовать анзац-состояние, предложенное в [36]:

$$|\psi(\theta)\rangle = \prod_{i=1}^n \prod_{j \in P_i} CR_y(\theta_{ij}) \prod_{i=1}^n R_y(\theta_i) |\psi_0\rangle, \quad (8)$$

где $R_y(\theta_i) = e^{-i\theta_i Y_i/2}$ – Y -вращение i -ого кубита, $CR_y(\theta_{ij})$ – вентиль управляемого Y -вращения, применяемый к паре i -го и j -го кубитов, где целевой кубит есть $j \in P_i$. Начальное состояние принимается равным $|\psi_0\rangle = |0\rangle^{\otimes n}$. Общее количество вариационных параметров θ в (8) равно $d = n + |E|$, где $|E|$ – количество направленных ребер в графе $G = (V, E)$. Пространство этих параметров θ ограничено $\Omega = [0, 2\pi]^{\times d}$. Заметим, что анзац (8) характеризуется ограниченной глубиной, а его структура повторяет геометрию задачи о разработке открытого карьера. Более того, пробное состояние $|\psi(\theta)\rangle$ остается вещественным в процессе оптимизации, что уменьшает количество требуемых вариационных параметров d .

Во-вторых, нам нужно выбрать подходящий классический оптимизатор для поиска оптимальных вариационных параметров (7). Оптимизация параметризованных квантовых схем, что неоднократно подчеркивалось выше, представляет собой довольно тонкий момент, поскольку целевая функция $E(\theta)$ в VQE обычно имеет несколько локальных минимумов при наличии проблемы исчезающе малых градиентов [37]. Эта проблема присутствует даже при использовании неградиентных методов оптимизации [39], таких как ограниченная оптимизация с линейной аппроксимацией (COBYLA) [50]. Кроме того, оптимизация вариационных анзац-состояний зависит от выбора начальных значений вариационных параметров. Чтобы преодолеть эти проблемы, ранее было разработано несколько методов, включающих стратегию инициализации идентификационного блока [40], схему оптимизации унитарного блока (UBOS) [51], эвристическую стратегию эволюции состояния [52] и другие [23, 41, 42]. В этой работе мы предлагаем другой подход, основанный на вероятностной оптимизации с использованием тензорных поездов [43].

Вероятностная оптимизация на основе тензорных поездов. В VQE внешний цикл классической оптимизации направлен на поиск глобаль-

ного минимума вещественнозначной целевой функции стоимости $E(\theta)$, где $\theta = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_d) \in \mathbb{R}^d$ – d -мерный вектор вариационных параметров, ограниченный на компакте $\Omega = [0, 2\pi]^{\times d}$. Введем d -мерную сетку дискретизации для θ на Ω с N узлами на каждое измерение. Теперь функцию $E(\theta)$ можно рассматривать как неявный d -мерный тензор $E[i_1, i_2, \dots, i_d] \in \mathbb{R}^{N \times N \times \dots \times N}$, где мультииндекс $(i_1, i_2, \dots, i_d)$ обозначает узлы сетки, а $1 \leq i_k \leq N$ для $k = 1, 2, \dots, d$. В результате наша изначальная задача непрерывной оптимизации (7) сводится к поиску минимального элемента тензора $E[i_1, i_2, \dots, i_d]$.

Алгоритм вероятностной тензорной оптимизации PROTES [43] основан на идее построения дискретного распределения $P[\tilde{\theta}]$ мультииндексов $\tilde{\theta} = (i_1, i_2, \dots, i_d)$, который с высокой вероятностью выбирает минимальный элемент $\tilde{\theta}_*$ тензора $E[\tilde{\theta}]$. Ясно, что это d -мерное распределение $P[\tilde{\theta}]$ является тензором той же размерности, что и исходный тензор $E[\tilde{\theta}]$. Однако общее число его элементов N^d растет экспоненциально с ростом d . Таким образом, для достаточно больших d невозможно вычислить и сохранить в памяти устройства целиком тензор $P[\tilde{\theta}]$. Для того, чтобы преодолеть эту проблему, можно применить малоранговые разложения в формате тензорных поездов (TT) [53, 54]

$$P[i_1, i_2, \dots, i_d] \cong \sum_{r_0=1}^{R_0} \sum_{r_1=1}^{R_1} \dots \sum_{r_d=1}^{R_d} G_1[r_0, i_1, r_1] \times \\ \times G_2[r_1, i_2, r_2] \dots G_d[r_{d-1}, i_d, r_d], \quad (9)$$

где $R_0, R_1, \dots, R_d$ (здесь предполагается, что $R_0 = R_d = 1$) – ранги тензорных поездов, а $G_k \in \mathbb{R}^{R_{k-1} \times N \times R_k}$ – трехмерные ядра для $k = 1, 2, \dots, d$. В PROTES ранги тензорных поездов предполагаются одинаковыми и равными $R \ll N$, где R – гиперпараметр алгоритма. Формат (9) тензора $P[\tilde{\theta}]$ позволяет сохранять его в компактной малоранговой форме так, что общее количество элементов линейно по d , ($d \cdot N \cdot R^2$). Но что более важно, многие алгебраические операции, включая умножение матрицы на вектор, интегрирование, свертку и т.д., могут быть эффективно реализованы с тензорами в формате тензорных поездов с линейной по d сложностью (подробный обзор см. [55, 56]). В частности, PROTES производит выборку мультииндекса $\tilde{\theta}$ с вероятностью, пропорциональной соответствующему значению $p = P[\tilde{\theta}]$ тензора, представленного в формате тензорного поезда, методом последовательного вычисления одномерных условных плотностей с эффективным интегрированием [57].

Опишем вкратце техническую сторону, связан-

ную с реализацией алгоритма PROTES. Мы начинаем алгоритм с выбора некоторого случайного неотрицательного тензора $P[\tilde{\theta}]$ в формате тензорного поезда, после чего реализуем следующие шаги, до тех пор пока не будет превышено заданное количество итераций:

Шаг 1. Выбираем из текущего распределения $P[\tilde{\theta}]$ произвольным образом K векторов-индексов и сохраняем их как $\Theta_K = \{\tilde{\theta}_1, \tilde{\theta}_2, \dots, \tilde{\theta}_K\}$.

Шаг 2. Вычисляем значения целевой функции для каждого вектора-индекса $e_1 = E[\tilde{\theta}_1]$, $e_2 = E[\tilde{\theta}_2]$, $\dots$, $e_K = E[\tilde{\theta}_K]$.

Шаг 3. Отбираем k векторов-индексов $S = \{s_1, s_2, \dots, s_k\}$ из Θ_K таких, что соответствующие значения целевой функции $e_i \leq e_j$ для всех $i \in S$ и $j \in \{1, 2, \dots, K\}/S$.

Шаг 4. Модифицируем тензор $P[\tilde{\theta}]$ таким образом, чтобы увеличить вероятность появления векторов-индексов из множества Θ_K на следующей итерации, используя k_{gd} шагов градиентного спуска для функции правдоподобия

$$L(\{\tilde{\theta}_{s_1}, \tilde{\theta}_{s_2}, \dots, \tilde{\theta}_{s_k}\}) = \sum_{i=1}^k \ln(P[\tilde{\theta}_{s_i}]). \quad (10)$$

со скоростью обучения λ .

После выполнения достаточного количества итераций тензор $P[\tilde{\theta}]$ должен иметь ярко выраженные пики для тех значений индексов, которые соответствуют минимальному элементу тензора $E[\tilde{\theta}]$. Обратим особое внимание на то, что в процессе выполнения алгоритма нет необходимости хранить все значения тензора $E[\tilde{\theta}]$, вместо этого нам необходимо вычислять лишь K элементов на каждой итерации. Кроме того, работа с тензором плотности вероятности $P[\tilde{\theta}]$ происходит в формате тензорного поезда. Вместе эти факторы обуславливают эффективность алгоритма. В свою очередь, значения ранга тензорных поездов R , количества отбираемых векторов-индексов на первом K и третьем k шагах алгоритма, а также число шагов градиентного спуска k_{gd} и скорость обучения λ на последнем шаге алгоритма являются гиперпараметрами и задаются пользователем.

Основные преимущества, связанные с использованием PROTES в рамках вариационных квантовых алгоритмов, можно резюмировать следующим образом. Во-первых, расчет в данной методологии не требует задания начальных значений вариационных параметров θ в отличие от стандартных методов оптимизации. Это позволяет избежать использования различных эвристических стратегий при

оптимизации параметризованных анзац-состояний с несколькими слоями. Во-вторых, в PROTES отсутствует необходимость локального приближения целевой функции $E(\theta)$, напротив глобальный минимум разыскивается с использованием полностью вероятностного подхода. В дальнейшем мы рассмотрим применение алгоритма PROTES в комбинации с классическим оптимизационным алгоритмом. Ключевая идея здесь будет состоять в том, чтобы сначала получить близкие к оптимальным значения вариационных параметров методом PROTES, а затем использовать их в качестве начального приближения для классического оптимизатора, улучшив тем самым конечный результат.

Численные результаты. Вычисления в рамках вариационного квантового алгоритма VQE выполнены с использованием программной реализации на основе пакета Qiskit [58]. В свою очередь для нахождения минимума целевой функции $E(\theta)$ нами сначала использовался алгоритм PROTES [43] для локализации окрестности оптимума, после чего проводились несколько итераций в рамках стандартного метода градиентного спуска на основе солвера BFGS (алгоритм Бroyдена–Флетчера–Гольдфарба–Шанно) [59]. Для PROTES были выставлены следующие значения гиперпараметров $R = 5$, $K = 1000$, $k = 100$, $k_{gd} = 1$, а также $\lambda = 0.05$; число обращений к целевой функции $E(\theta)$ было ограничено величиной $m = 10^5$. Для дискретизации целевой функции для каждого из параметров $\Omega = [0, 2\pi]^{\times d}$ использовались $N = 100$ точек. Несмотря на то, что PROTES принадлежит к числу вероятностных алгоритмов, мы не обнаружили влияние его вариативности на конечный результат. После достаточного количества итераций PROTES за один запуск можно достичь точки θ , которая в рамках последующих итераций в рамках алгоритма BFGS позволит идентифицировать основное состояние данной системы. Для сравнения мы минимизировали целевую функцию $E(\theta)$ с использованием классических градиентных методов вроде BFGS и безградиентного COBYLA, реализованных в библиотеке SciPy (версия 1.10.0) [60]. Отметим, что в обеих реализациях использовались значения параметров по умолчанию и 100 запусков VQE со случайно выбранными значениями вариационных параметров θ , равномерно распределенных на Ω .

Мы продемонстрировали преимущества, связанные с использованием алгоритма PROTES для оптимизации параметризованных квантовых схем, в случае трех различных задач, приведенных на рис. 1. Для удобства статистика по 100 запускам моделирования VQE с использованием классических оптими-

Таблица 1. Результаты расчетов для модельных задач открытой разработки месторождений (рис. 1) с использованием классических оптимизаторов BFGS и COBYLA, где d – общее количество вариационных параметров, E_* – оптимальное значение целевой функции, а статистика, собранная на основе 100 запусков алгоритма VQE, включает в себя среднее значение целевой функции $\langle E_{\text{calc}} \rangle$, среднее число вычислений целевой функции N_{eval} , и число успешных случаев достижения минимального оптимального значения целевой функции в процентном соотношении

Задача	d	E_*	BFGS			COBYLA		
			$\langle E_{\text{calc}} \rangle$	N_{eval}	Успешный %	$\langle E_{\text{calc}} \rangle$	N_{eval}	Успешный %
Рис. 1a	21	–40	–3.90	229.24	10	–18.74	1035.05	50
Рис. 1b	30	–20	–12.60	753.61	11	–15.63	1098.14	15
Рис. 1c	29	–20	–16.33	648.90	11	–18.04	1494.61	12

заторов BFGS и COBYLA сведена в табл. 1. Эволюция целевой функции $E(\theta)$ в зависимости от числа обращений к ней для первой двумерной задачи, представленной на рис. 1a, показана на рис. 2. Штрафной коэффициент (6) принимается равным $\gamma = 45$. Как можно заметить, результаты обоих классических оптимизаторов BFGS и COBYLA сильно зависят от начального выбора вариационных параметров. Производительность BFGS очень низкая, поскольку усредненная целевая функция $E(\theta)$ сходится к $\langle E_{\text{calc}} \rangle = -3.90$, что достаточно далеко от оптимального значения $E_* = -40$ (см. рис. 2a). Наши численные результаты показывают, что только около 10 % запусков VQE с оптимизатором BFGS успешно достигают минимума. Большинство симуляций (около 75 %) попадают в локальный минимум при $E = 0$. Ситуация улучшается при использовании неградиентного оптимизатора COBYLA. Здесь усредненное значение целевой функции сходится к $\langle E_{\text{calc}} \rangle = -18.74$, а около 50 % расчетов достигают оптимального значения целевой функции. Здесь можно указать на значительное преимущество неградиентного метода COBYLA над градиентным BFGS, применяемым для оптимизации вариационных квантовых схем, однако даже использование COBYLA не гарантирует достижения оптимального значения. Напротив, оптимизатор PROTES не зависит от выбора начального приближения для вариационных параметров и сходится к $E_* = -40$. Как видно на рис. 2b, после 10^5 обращений к целевой функции PROTES достигает такого приближения к оптимальным вариационным параметрам θ_* , что для сходимости к минимуму требуется лишь несколько последующих вычислений функции с использованием оптимизатора BFGS.

Такое поведение справедливо и для общего случая двумерной задачи, показанной на рис. 1b. Значение штрафного коэффициента условимся считать равным $\gamma = 5, 33$. Как видно на рис. 3a, для этой модели оптимизатор COBYLA снова превосходит результаты BFGS. В частности, усредненная целевая функция, рассчитанная с помощью оптимизатора

BFGS, сходится к $\langle E_{\text{calc}} \rangle = -12.60$, при этом только в 11 % случаях удается достичь оптимального значения целевой функции. Оптимизатор COBYLA обеспечивает лучшую оценку $\langle E_{\text{calc}} \rangle = -15.63$, но его производительность сравнима с результатами BFGS по количеству успешных запусков (15 %). Интересно, что использование алгоритма PROTES с последующими несколькими итерациями оптимизатора BFGS позволяет сойтись к оптимальному значению целевой функции (см. рис. 3b).

Для трехмерной задачи определения предельных контуров открытого карьера (см. рис. 1c) численные результаты представлены на рис. 4. Здесь мы установили штрафной коэффициент (6) равным $\gamma = 2.75$. Результаты VQE аналогичны результатам, полученным для двумерных моделей. Используя оптимизатор BFGS, мы получаем усредненное значение целевой функции $\langle E_{\text{calc}} \rangle = -16.33$, что показано на рис. 4a. В этом случае около 11 % запусков VQE достигают оптимального значения $E_* = -20$, а более 30 % из них застревают на уровне $E = -18$. Оптимизатор COBYLA немного улучшает результаты: $E(\theta)$ в среднем сходится к $\langle E_{\text{calc}} \rangle = -18.04$ (см. рис. 4a). Однако только в 12 % случаев удается достичь оптимального значения целевой функции, в то время как в большинстве случаев (около 40 %) система оказывается в одном из локальных минимумов при $E = -19$. Наконец, используя комбинацию оптимизаторов PROTES и BFGS, можно преодолеть проблемы оптимизации и получить оптимальные вариационные параметры θ_* целевой функции $E(\theta)$, соответствующие оптимальному значению $E_* = -20$ (см. рис. 4b).

Данные о расчетах с использованием классических оптимизаторов также представлены в табл. 1. Наши результаты показывают, что в рамках одного запуска VQE необходимо выполнить около 10^2 – 10^3 вычислений целевой функции $E(\theta)$. Таким образом, для анализа статистики, собранной за 100 запусков, необходимо провести около 10^5 вычислений целевой функции, что сопоставимо с одним запуском с ис-

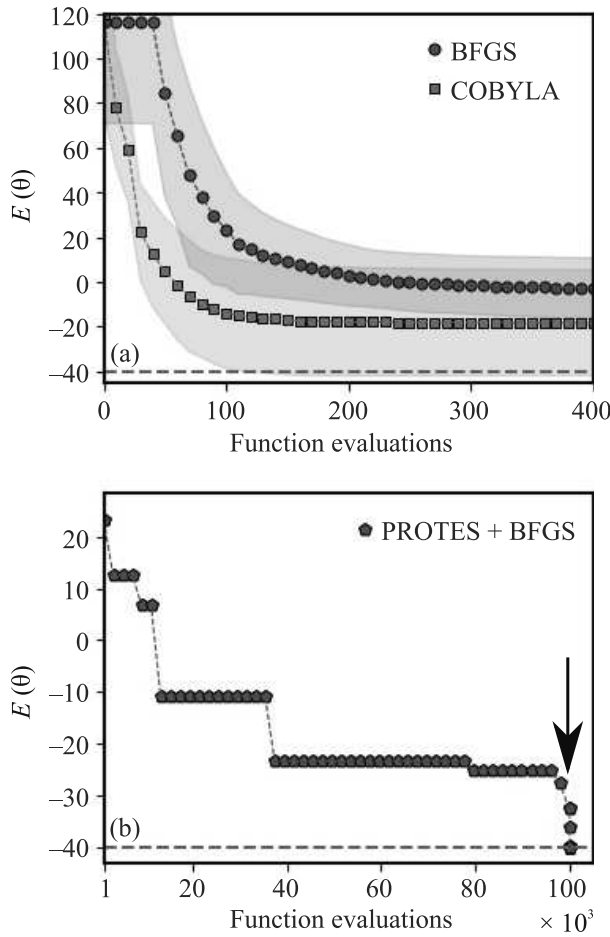


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость целевой функции $E(\theta)$ в алгоритме VQE от количества ее вычислений для оптимизаторов BFGS, COBYLA (a) и комбинации методов PROTES и BFGS (b) для двумерной задачи открытой разработки месторождения, показанной на рис. 1a. Расчеты с помощью классических методов BFGS и COBYLA усреднены по 100 запускам со случайным начальным приближением, распределенным равномерно на $[0, 2\pi]^{\times d}$. Закрашенные области соответствуют среднеквадратичному разбросу значений $E(\theta)$, а пунктиром отмечен уровень оптимального значения целевой функции $E_* = -40$. Черной стрелкой обозначена точка переключения, после которой расчет в рамках тензорного метода PROTES заменяется на классический оптимизатор BFGS

пользованием алгоритма PROTES. Также стоит отметить, что для сложных задач невозможно определить точное минимальное значение целевой функции, что ограничивает возможность проверки оптимального значения энергии после серии запусков расчета с использованием классического оптимизатора. Представленный альтернативный подход, основанный на алгоритме PROTES, позволяет избежать накопления статистических ошибок за несколько рас-

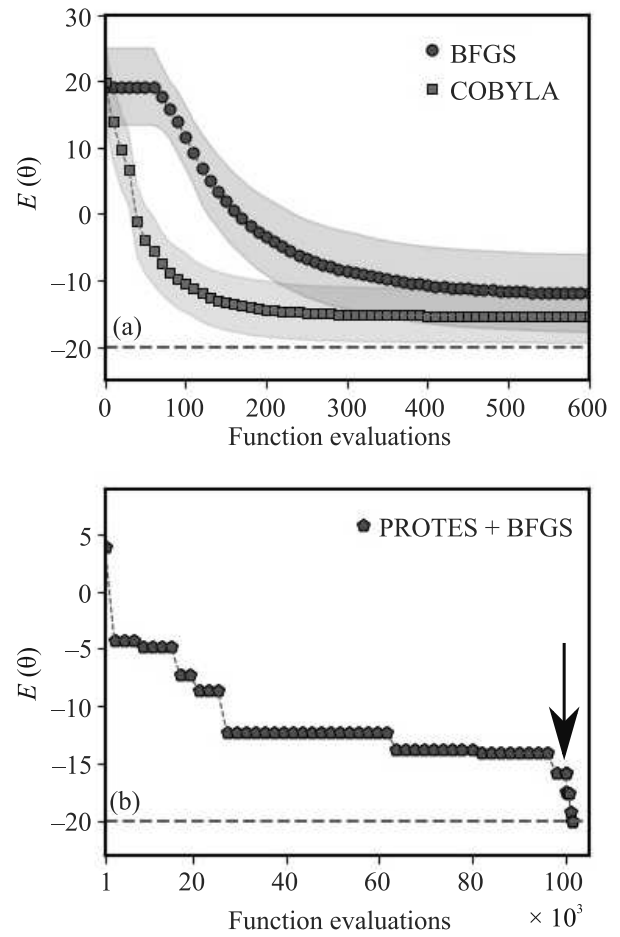


Рис. 3. (Цветной онлайн) Аналогично рис. 2, но для обобщенной двумерной модели открытого карьера, показанной на рис. 1b. Пунктирная линия обозначает уровень оптимального значения целевой функции $E_* = -20$

четов и гарантирует достижение оптимального значения, что можно использовать для верификации результатов, полученных с использованием различных доступных методов оптимизации. В то же время для некоторых конкретных неглубоких параметризованных квантовых схем, где общее число вариационных параметров невелико, например, в QAOA, подход на основе алгоритма PROTES требует на порядки меньшего количества вычислений целевой функции для достижения оптимального значения по сравнению с представленными результатами для задачи открытой добычи полезных ископаемых (см. [61]), что также делает этот подход альтернативой существующим классическим методам оптимизации.

Заключение. В рамках квантового алгоритма VQE нами предложен новый метод оптимизации параметризованных квантовых схем, предполагающий использование комбинации вероятностного алгорит-

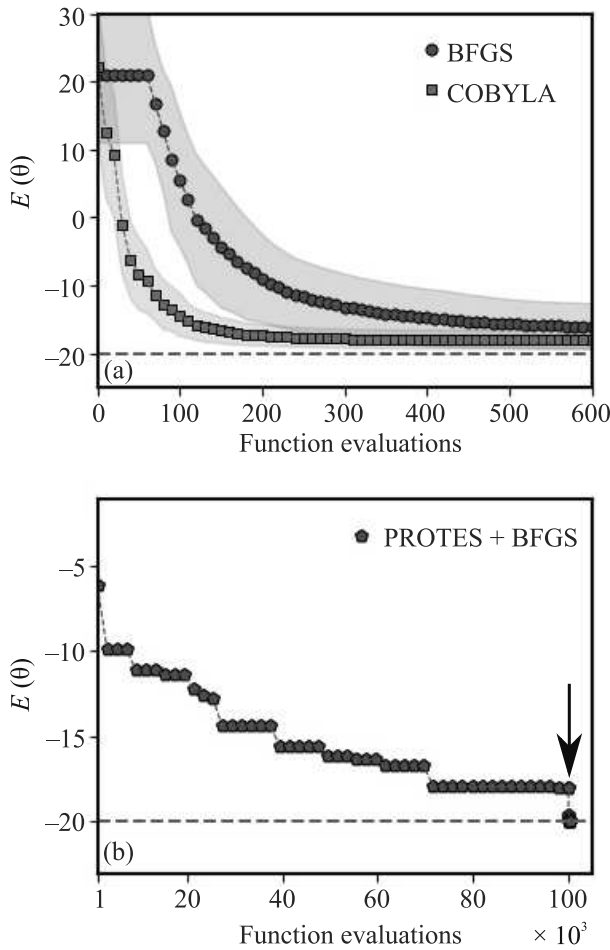


Рис. 4. (Цветной онлайн) Аналогично рис. 2, но для случая трехмерной модели открытого карьера, показанного на рис. 1с. Пунктирная линия отмечает положение уровня оптимального значения целевой функции $E_* = -20$

ма тензорной оптимизации и классического подхода на основе градиентного спуска для нахождения оптимального значения целевой функции. Оптимизация включает таким образом два шага: на первом – целевая функция $E(\theta)$ алгоритма VQE рассматривается дискретным образом в форме многомерного тензора, глобальный минимум которого θ_* вычисляется с помощью PROTES. Небезынтересно, что данный метод обладает несколькими достоинствами с точки зрения оптимизации параметризованных квантовых схем: в самом деле, он не предполагает использование эвристик для задания начального приближения для вариационных параметров. Не менее важно то, что PROTES не использует локальные свойства целевой функции, например, ее градиент; напротив, использует подход в духе стохастической оптимизации, что позволяет избежать проблемы с исчезающе ма-

лыми градиентами. На втором этапе предложенного нами подхода, значения вариационных параметров θ'_* , полученные с использованием PROTES, передаются в качестве начального значения классическому градиентному оптимизатору, несколько итераций которого позволяют улучшить конечный результат оптимизации в локальной окрестности θ'_* .

Преимущества предложенного подхода продемонстрированы нами на примере задачи разработки открытого месторождения, представленной в форме задачи бинарной оптимизации, где структура месторождения моделируется с помощью направленного графа. Для решения задачи, которую можно свести к задаче поиска основного состояния соответствующего гамильтониана, использован вариационный квантовый алгоритм VQE. Для двумерной и трехмерной задач разработки открытого карьера исследована эволюция целевой функции $E(\theta)$ в зависимости от числа обращений к ней различными оптимизаторами. Показано, что результат оптимизации как в случае использования классических градиентных, так и в случае неградиентных методов оптимизации, крайне чувствителен к выбору начального приближения для вариационных параметров. Продemonстрировано, что неградиентный метод оптимизации COBYLA обладает лучшей сходимостью по сравнению с градиентным методом BFGS, однако в обоих случаях расчет застревает в состоянии локального минимума. Использование метода оптимизации на основе PROTES позволяет избежать данной проблемы и гарантирует достижение целевой функцией $E(\theta)$ оптимального значения. Для рассмотренных нами задач найдено, что использование PROTES в квантовом алгоритме VQE требует большего числа вычислений целевой функции по сравнению с классическими оптимизаторами, но позволяет избежать сбора статистики по нескольким расчетам в рамках квантового алгоритма. Мы предполагаем, что предложенный нами подход может найти приложения для разработки эффективных методов оптимизации в контексте вариационных квантовых алгоритмов.

Авторы выражают признательность за предоставление вычислительных ресурсов суперкомпьютера Сколтеха “Zhores” [62] для проведения вычислений.

Финансирование работы. Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда #22-11-00074.

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

1. J. Preskill, *Quantum* **2**, 79 (2018).
2. M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, 10th Anniversary Edition, Cambridge University Press, Cambridge (2010).
3. H. J. Briegel, D. Browne, W. Dür, R. Raussendorf, and M. van den Nest, *Nat. Phys.* **5**, 19 (2009).
4. R. Raussendorf and T.-C. Wei, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **3**, 239 (2012).
5. E. Farhi, J. Goldstone, S. Gutmann, and M. Sipser, *arXiv:quant-ph/0001106* (2000).
6. D. Aharonov, W. van Dam, J. Kempe, Z. Landau, S. Lloyd, and O. Regev, *arXiv:quant-ph/0405098* (2004).
7. J. Biamonte, P. Wittek, N. Pancotti, P. Rebentrost, N. Wiebe, and S. Lloyd, *Nature* **549**, 195 (2017).
8. J. Biamonte, *Phys. Rev. A* **103**, L030401 (2021).
9. M. P. Harrigan, K. J. Sung, M. Neeley et al. (Collaboration), *Nat. Phys.* **17**, 332 (2021).
10. S. Ebadi, A. Keesling, M. Cain et al. (Collaboration), *Science* **376**, 1209 (2022).
11. S. Yarkoni, E. Raponi, T. Bäck, and S. Schmitt, *Rep. Prog. Phys.* **85**, 104001 (2022).
12. M.-T. Nguyen, J.-G. Liu, J. Wurtz, M. D. Lukin, S.-T. Wang, and H. Pichler, *PRX Quantum* **4**, 010316 (2023).
13. A. Peruzzo, J. McClean, P. Shadbolt, M.-H. Yung, X.-Q. Zhou, P. J. Love, A. Aspuru-Guzik, and J. L. O'Brien, *Nat. Commun.* **5**, 4213 (2014).
14. E. Farhi, J. Goldstone, and S. Gutmann, *arXiv:1411.4028* (2014).
15. N. Moll, P. Barkoutsos, L. S. Bishop et al. (Collaboration), *Quantum Sci. Technol.* **3**, 030503 (2018).
16. Y. Cao, J. Romero, J. P. Olson, M. Degroote, P. D. Johnson, M. Kieferova, I. D. Kivlichan, T. Menke, B. Peropadre, N. P. D. Sawaya, S. Sim, L. Veis, and A. Aspuru-Guzik, *Chem. Rev.* **119**, 10856 (2019).
17. A. Kardashin, A. Pervishko, J. Biamonte, and D. Yudin, *Phys. Rev. A* **104**, L020402 (2021).
18. J. Kattemölle and J. van Wezel, *Phys. Rev. B* **106**, 214429 (2022).
19. M. Schuld, I. Sinayskiy, and F. Petruccione, *Contemp. Phys.* **56**, 172 (2015).
20. J. Biamonte, P. Wittek, N. Pancotti, P. Rebentrost, N. Wiebe, and S. Lloyd, *Nature* **549**, 195 (2017).
21. M. Cerezo, A. Arrasmith, R. Babbush, S. C. Benjamin, S. Endo, K. Fujii, J. R. McClean, K. Mitarai, X. Yuan, L. Cincio, and P. J. Coles, *Nat. Rev. Phys.* **3**, 625 (2021).
22. G. E. Crooks, *arXiv:1811.08419* (2018).
23. L. Zhou, S.-T. Wang, S. Choi, H. Pichler, and M. D. Lukin, *Phys. Rev. X* **10**, 021067 (2020).
24. F. G. Fuchs, H. Kolden, N. H. Aase, and G. Sartor, *SN Comput. Sci.* **2**, 89 (2021).
25. S. Bravyi, A. Kliesch, R. Koenig, and E. Tang, *Quantum* **6**, 678 (2022).
26. M. T. Khumalo, H. A. Chieza, K. Prag, and M. Woolway, *Neural. Comput. & Applic.*, 1 (2022).
27. W. Qian, R. A. M. Basili, M. M. Eshaghian-Wilner, A. Khokhar, G. Luecke, and J. P. Vary, *Entropy* **25**, 1238 (2023).
28. U. Azad, B. K. Behera, E. A. Ahmed, P. K. Panigrahi, and A. Farouk, *IEEE Trans. Intell. Transp. Sys.* **24**, 7564 (2023).
29. H. Lerch and I. F. Grossmann, *Trans. CIM* **68**, 17 (1965).
30. C. Meagher, R. Dimitrakopoulos, and D. Avis, *J. Min. Sci.* **50**, 508 (2014).
31. D. S. Hochbaum and A. Chen, *Oper. Res.* **48**, 894 (2000).
32. R. Khalokakaie, P. A. Dowd, and R. J. Fowell, *Min. Tech.* **109**, 77 (2000).
33. D. S. Hochbaum, *Oper. Res.* **56**, 992 (2008).
34. T. Hao, X. Huang, C. Jia, and C. Peng, *Front. Phys.* **10**, 90659010 (2022).
35. A. Peruzzo, J. McClean, P. Shadbolt, M.-H. Yung, X.-Q. Zhou, P. J. Love, A. Aspuru-Guzik, and J. L. O'Brien, *Nat. Commun.* **5**, 4213 (2014).
36. Y. Hindy, J. Pointing, M. Tolunay, S. Venkatarao, M. Motta, and J. A. Latone, *arXiv:2107.11345* (2021).
37. J. R. McClean, S. Boixo, V. N. Smelyanskiy, R. Babbush, and H. Neven, *Nat. Commun.* **9**, 4812 (2018).
38. D. Wierichs, C. Gogolin, and M. Kastoryano, *Phys. Rev. Res.* **2**, 043246 (2020).
39. A. Arrasmith, M. Cerezo, P. Czarnik, L. Cincio, and P. J. Coles, *Quantum* **5**, 558 (2021).
40. E. Grant, L. Wossnig, M. Ostaszewski, and M. Benedetti, *Quantum* **3**, 214 (2019).
41. A. A. Mele, G. B. Mbeng, G. E. Santoro, M. Collura, and P. Torta, *Phys. Rev. A* **106**, L060401 (2022).
42. K. Zhang, L. Liu, M.-H. Hsieh, and D. Tao, *arXiv:2203.09376* (2022).
43. A. Batsheva, A. Chertkov, G. Ryzhakov, and I. Oseledets, *arXiv:2301.12162* (2023).
44. A. Kandala, A. Mezzacapo, K. Temme, M. Takita, M. Brink, J. M. Chow, and J. M. Gambetta, *Nature* **549**, 242 (2017).
45. S. Sim, P. D. Johnson, and A. Aspuru-Guzik, *Adv. Quantum Technol.* **2**, 1900070 (2019).
46. M. Larocca, N. Ju, D. García-Martín, P. J. Coles, and M. Cerezo, *Nat. Comput. Sci.* **3**, 542 (2023).
47. J. Romero, R. Babbush, J. R. McClean, C. Hempel, P. J. Love, and A. Aspuru-Guzik, *Quantum Sci. Technol.* **4**, 014008 (2019).
48. P.-L. Dallaire-Demers, J. Romero, L. Veis, S. Sim, and A. Aspuru-Guzik, *Quantum Sci. Technol.* **4**, 045005 (2019).

49. D. Wecker, M. B. Hastings, and M. Troyer, *Phys. Rev. A* **92**, 042303 (2015).
50. M. J. D. Powell, *A Direct Search Optimization Method That Models the Objective and Constraint Functions by Linear Interpolation* in *Advances in Optimization and Numerical Analysis*, Springer, Dordrecht (1994).
51. L. Slattey, B. Villalonga, and B. K. Clark, *Phys. Rev. Res.* **4**, 023072 (2022).
52. M. S. Jattana, F. Jin, H. De Raedt, and K. Michielsen, *Phys. Rev. Appl.* **19**, 024047 (2023).
53. I. Oseledets and E. Tyrtyshnikov, *Linear Algebra Appl.* **432**, 70 (2010).
54. I. V. Oseledets, *SIAM J. Sci. Comput.* **33**, 2295 (2011).
55. A. Cichocki, N. Lee, I. Oseledets, A. H. Phan, Q. Zhao, and D. P. Mandic, *Found. Trends Mach. Learn.* **9**, 249 (2016).
56. A. Cichocki, N. Lee, I. Oseledets, A. H. Phan, Q. Zhao, and D. P. Mandic, *Found. Trends Mach. Learn.* **9**, 431 (2017).
57. S. Dolgov, K. Anaya-Izquierdo, C. Fox, and R. Scheichl, *Stat. Comput.* **30**, 603 (2020).
58. G. Aleksandrowicz, T. Alexander, P. Barkoutsos et al. (Collaboration), <https://doi.org/10.5281/zenodo.2562111> (2019).
59. J. E. Dennis and R. B. Schnabel, *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*, SIAM, Philadelphia (1996).
60. P. Virtanen, R. Gommers, T. E. Oliphant et al. (Collaboration), *Nat. Methods* **17**, 261 (2020).
61. G. Paradezhenko, A. Pervishko, and D. Yudin, *Phys. Rev. A* **109**, 012436 (2024).
62. I. Zacharov, R. Arslanov, M. Gunin et al. (Collaboration), *Open Eng.* **9**, 512 (2019).

Содержание
Том 119, выпуск 5
Астрофизика и космология

Куденко М.А., Троицкий С.В. Аномальные корреляции космических лучей, пересмотренные с использованием полной по всему небу выборки лацертид 325

Миронов С.А., Штенникова А.М. Возмущения в теории Хорндески над анизотропным космологическим фоном 330

Оптика, лазерная физика

Хайруллин А.Ф., Смирнова А.М., Арсланов Н.М., Федотов А.Б., Моисеев С.А., Федотов И.В., Смирнов М.А. Источник междиапазонных фотонных пар на основе фотонно-кристаллического волокна с непрерывной накачкой 336

Стремоухов С.Ю., Форш П.А., Хабарова К.Ю., Колачевский Н.Н. Модель связанных квантовых мемристоров на основе пойманного в ловушку одиночного иона $^{171}\text{Yb}^+$ 343

Конденсированное состояние

Волков Д.А., Габриелян Д.А., Матвеев А.А., Сафин А.Р., Калябин Д.В., Хафизов А.А., Маркелова М.Н., Кауль А.Р., Никитов С.А. Спиновая накачка из $\text{Lu}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ 348

Звездин А.К., Дубровин Р.М., Кимель А.В. Гигантское параметрическое усиление обратного эффекта Коттона–Мутона в антиферромагнитных кристаллах 355

Ниязов Р.А., Крайнов И.В., Аристов Д.Н., Качоровский В.Ю. Дробовый шум в геликоидальных краевых состояниях в присутствии статического магнитного дефекта 364

Похабов Д.А., Погосов А.Г., Шевырин А.А., Жданов Е.Ю., Бакаров А.К. Особенности квантования кондактанса многоканальных квантовых точечных контактов 372

Томилин В.А., Ростом А.М., Ильичев Л.В. Конфигурация “барьер–яма” в схеме квантового гироскопа на основе геометрической фазы атомарного конденсата 381

Нелинейные явления

Dmitriev A.S., Dmitrieva E.A., Panin A.G. Scattering of linear waves on a soliton 388

Квантовая информатика

Молотков С.Н., Щербаченко А.А. О стойкости систем квантового распределения ключей типа RFI (Reference Frame Independent) к атакам активного зондирования 390

Разное

Костюков А.Д., Карпов М.А. Характеристики электромагнитного излучения из образцов кварца, ниобата лития и полиметилметакрилата при их ударном нагружении 402

Содержание
Том 119, выпуск 6
Оптика, лазерная физика

Смирнов Н.А., Гулина Ю.С., Буслеев Н.И., Пахольчук П.П., Горевой А.В., Винс В.Г., Кудряшов С.И. Прямое многофотонное фемтосекундное ИК-лазерное возбуждение решетки алмаза в двухфононной области и модификация центров окраски 411

Agarov D., Ivchenko A., Magnitskiy S. Deep learning ghost polarimetry 417

Плазма, гидро- и газодинамика

Шохрин Д.В., Копнин С.И., Попель С.И. Пылевая плазма у поверхности Энцелада – спутника Сатурна 419

Конденсированное состояние

Жданова М.В., Пологов И.Е., Свяцкий Г.Ю., Чичков В.И., Малеева Н.А. Исследование нелинейности кинетической индуктивности гранулированного алюминия 426

Семакин А.С., Мухамедшин И.Р., Зыбцев С.Г., Покровский В.Я. Особенности низкотемпературной волны зарядовой плотности в моноклинной фазе NbS_3 , проявляющиеся в ЯМР и в транспортных свойствах 432

Естюнина Т.П., Тарасов А.В., Ерыженков А.В., Естюнин Д.А., Шикин А.М. Модификация топологических поверхностных состояний в новых синтетических топологических системах $\text{Mn}_{1-x}\text{A}_x\text{Bi}_2\text{Te}_4/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ ($\text{A} = \text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}, \text{Pb}$) 439

Кончаков Р.А., Макаров А.С., Афонин Г.В., Цзизао Ц.Ч., Кобелев Н.П., Хоник В.А. Связь хрупкости металлических стекол с энтропией смешения и избыточной энтропией по отношению к материнскому кристаллу 446

Снегирёв Н.И., Куликов А.Г., Любутин И.С., Серегин А.Ю., Ягупов С.В., Стругацкий М.Б. Визуализация магнитной доменной структуры в монокристаллах FeVO_3 и $\text{Fe}_{0.94}\text{Ga}_{0.06}\text{VO}_3$ методом синхротронной рентгеновской топографии 452

Квантовая информатика

Парадеженко Г., Первишко А., Юдин Д. Вариационная квантовая оптимизация открытого карьера 459