

Том 119, Выпуск 7–8

ISSN 0370-274X  
Апрель 2024

*Письма*

*в*

**ЖУРНАЛ**

**ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ**

*и*

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ**

**ФИЗИКИ**



2024 г. Том 119 вып. 7, стр. 473–562

2024 г. Том 119 вып. 8, стр. 563–632



НАУКА

— 1727 —

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

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

**том 119**

Выпуск 7

10 апреля 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>**

---

© Российская академия наук, 2024

© Редакция журнала “Письма в ЖЭТФ” (составитель), 2024

# К теории катастроф для гомотопий Хованова–Рожанского

А. Анохина<sup>1)</sup>

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

Поступила в редакцию 17 февраля 2024 г.

После переработки 5 марта 2024 г.

Принята к публикации 6 марта 2024 г.

Мы предлагаем еще один способ рассматривать наблюдаемые в когомологической квантовой теории поля, которые являются инвариантами узлов Хованова(–Рожанского). Для этого мы кратко резюмируем наши результаты относительно скачков в аналитических формулах для полиномов Хованова(–Рожанского). Из эмпирических данных мы заключаем, что здесь имеют место “регулярные” и “странные” катастрофы, которые кардинально различаются видом связанных с ними скачков в полиномах Хованова(–Рожанского). Это первый шаг к теории катастроф для наблюдаемых в когомологической квантовой теории поля.

DOI: 10.31857/S1234567824070012, EDN: KRBBVK

**1. Введение.** В последние несколько десятилетий топологические объекты активно изучаются в физическом контексте, так как они связаны с непертурбативными эффектами в различных физических моделях [1]. Относительно простым, но глубоко нетривиальным топологическим объектом являются узлы. Узлы возникают как топологические классы вильсоновских петель в квантовой теории поля, а инварианты узлов играют роль наблюдаемых в топологических квантовых теориях поля (таких, как трехмерная теория Черна–Саймонса), где существенен только топологический класс вильсоновской петли [2]. С другой стороны, узлы можно использовать для описания квантовой запутанности, а инварианты узлов могут иметь приложения к теории топологического квантового компьютера [3]. В настоящем письме мы обсуждаем возможный подход к классу инвариантов узлов, который весьма близок к Теории катастроф для динамических систем.

Теория катастроф [4] – это мощный метод математической физики для изучения нелинейных динамических систем [5]. Обычно он применяется к системам дифференциальных уравнений, но близок по духу к гомотопическому исчислению в топологии [6]. Своего рода гибрид этих двух областей известен как когомологическая квантовая теория поля (ККТП) [7–10]. Такие модели представляются очень интересными и глубокими, и они могли бы быть полезными в различных приложениях как новые инструменты теории катастроф. Наша задача – использовать гомотопическое исчисление для узлов, чтобы раз-

вивать “Когомологическую теорию катастроф”. Под этим мы понимаем изучение семейства конструктивно определенных моделей ККТП, связанных с гомотопиями Хованова–Рожанского [11–14] для различных семейств узлов [15–17].

В обычном и изначальном смысле теорий катастроф называют метод работы с функциями, которые в ответ на непрерывное изменение аргумента испытывают дискретный скачок. Здесь же речь о функции дискретной величины: набора целых чисел – параметров, задающих узел внутри заданного семейства узлов. Основное сообщение этого письма состоит в том, что с этой функцией тем не менее можно работать методом, аналогичным классической теории катастроф. А именно, в определенных областях пространства параметров данная функция удовлетворяет разностным уравнениям и задается выражением, которое допускает аналитическое продолжение от целых к произвольным вещественным значениям параметров (для краткости мы здесь называем такую зависимость аналитической). В отличие от этого, на границах областей функция меняется скачком, который нарушает аналитическую зависимость, а разностные уравнения не выполняются. Как именно это может происходить, иллюстрируют примеры ниже. Каждый случай подробнее разобран в предыдущих работах нашей группы, приведенных в списке литературы. Здесь мы хотим подвести итог этим исследованиями и сделать выводы из накопленного материала.

**2. Два основных вида катастроф полиномов  $KhR_N$ .** Полином Хованова–Рожанского для калибровочной группы  $SU_N(KhR_N)$  в качестве индек-

<sup>1)</sup>e-mail: anokhina@itep.ru

са ранг группы  $N$ , зависит от формальной “квантовой” переменной  $q$  и от формальной “гомологической” переменной  $t$ , а также равен полиному ХОМФЛИ в качестве граничного условия при  $t = -1$ :  $KhR_N(t = -1, q) = H_N(q)$ . Коэффициенты при степенях  $q$  и  $t$  в  $KhR_N$  нумеруют размерности гомологий, и поэтому они целые положительные. Ниже мы называем полином Лорана со всеми положительными (отрицательными) коэффициентами *положительным (отрицательным) полиномом*, а полином с различными знаками коэффициентов – *знакоопределенным*.

Формализм  $\mathcal{R}$ -матриц для полинома ХОМФЛИ [18] подразумевает, что полиномы ХОФМЛИ для семейства узлов, порожденного *эволюцией* диаграммы узла, то есть вставкой в ее некое место повторяющегося фрагмента (например, двунитевой косы с  $2n + 1$  пересечениями), аналитически зависит от параметров семейства  $n_i$  через экспоненты  $\lambda_i^{n_i}$ , где  $\lambda_i$  (которые мы называем *собственными значениями*) – общие для семейства узлов, и, более того, для многих семейств узлов [19]. Удивительным образом, очень похожее экспоненциальное поведение на тех же семействах узлов наблюдается для полиномов  $KhR_N$  [15–17] – с точностью до отдельных скачков в аналитических выражениях, которые в силу граничного условия имеют вид  $KhR_N \rightarrow KhR_N + (1 + t)KhR''_N$ . С тем же успехом можно написать:

$$KhR_N = KhR'_N + (-t)^{\Theta_s} KhR''_N,$$

$$\Theta_s = \begin{cases} 1, & s \geq 0 \\ 0, & s < 0 \end{cases}, \tag{1}$$

– где  $s$  зависит как от параметров семейства  $\{n_i\}$ , так и от начального узла (с  $n_i = 0$ ), но ни  $KhR'_N$ , ни  $KhR''_N$  не имеют скачков в окрестности точки  $s = 0$ . Мы называем такие нарушения аналитической зависимости **катастрофами**  $KhR_N$  (по аналогии с катастрофами аналитических решений нелинейных ОДУ).

**3. Регулярные катастрофы.** В настоящем разделе мы рассмотрим случаи, когда  $KhR''_N$  в (1) есть полином  $KhR_N$  для двунитевого узла, либо его небольшая модификация (см. примеры ниже). Мы называем такие катастрофы *регулярными*. Комплекс  $KhR_N$  для двунитевой косы имеет практически одинаковый вид для всех  $N$  [14]. Поэтому мы можем сосредоточиться здесь на полиноме Хованова  $Kh \equiv KhR_2$ , к которому относятся большинство наших явных формул.

*Двунитевые торические и скрученные узлы.* Основная составляющая в примерах ниже – это  $Kh$

двунитевого торического узла [12], который является стандартным замыканием двунитевой параллельной косы (рис. 1а),

$$Kh^{\text{Tor}_{2,2n+1}} = (-t)^{-\Theta_n} q^{2n} F_{2n+1}(q^2 t),$$

$$\Theta_n = \begin{cases} 1, & n \geq 0 \\ 0, & n < 0 \end{cases}, \tag{2}$$

$$F_{2n+1}(\lambda) = 1 + \lambda^2 \frac{1 - \lambda^{2n}}{1 - \lambda} = \begin{cases} 1 + \lambda^2 + \lambda^3 + \dots + \lambda^{2n+1}, & n \geq 0 \\ -\lambda - \lambda^{-1} - \lambda^{-2} - \dots - \lambda^{2-2n} & n < 0 \end{cases}.$$

При  $n > 0$   $F_{2n+1}(\lambda)$  – положительный полином от  $\lambda$ , чьи коэффициенты есть размерности гомологий  $Kh$ . При  $n < 0$ ,  $F_{2n+1}(\lambda)$  – отрицательный полином, чьи коэффициенты не могут быть размерностями гомологий. Однако множитель  $(-t)^{-\Theta_n}$  изменяет свое значение с 1 при  $n > 0$  на  $-t^{-1}$  при  $n < 0$  и компенсирует знаки<sup>2</sup>. Граничное условие для  $Kh$  сохраняется, так как  $(-t)^{\Theta_n} \equiv 1$  при  $t = -1$ . Как показывает непосредственная проверка, (2) согласовано с зеркальной симметрией для полиномов Хованова [11], а именно:  $Kh_2^{\text{Tor}_{2,2n+1}}(q, t) = Kh_2^{\text{Tor}_{2,-2n-1}}(\frac{1}{q}, \frac{1}{t})$ .

Скрученный узел, который получается с помощью замыкающего элемента из двунитевой антипараллельной косы (рис. 1б), имеет полином  $Kh$

$$Kh^{\text{Tw}_{2n}} = (-t)^{-\Theta_n} (q^2 t)^{-2n} G_{2n}(q^2 t),$$

$$G_{2n}(\lambda) = 1 + \lambda \frac{(1 + \lambda^2)(1 - \lambda^{2n})}{1 - \lambda}, \tag{3}$$

похожий на таковой для двунитевого торического узла<sup>3</sup>. Более того, можно аналогичным образом рассмотреть некий гибрид двунитевых торических и скрученных узлов [21].

*Множественные двунитевые косы в “тонких” крендельных узлах.* Следующий случая – это крендельный узел рода  $g$ ,  $P_{n_0, \dots, n_g}$  (рис. 1с). Как показано в [16], аналитическая формула для полинома  $Kh$  узла  $P_{n_0, \dots, n_g}$  существует при всех  $n_i > 0$ . Далее, есть ряд так называемых регулярных областей в пространстве параметров  $\{n_i\}$ , где некоторые  $n_i < 0$  и

<sup>2</sup>Ценой уменьшения всех степеней  $t$  на 1, что соответствует сдвигу последовательности гомологических размерностей на один относительно последовательности пространств комплекса.

<sup>3</sup>Заметим, что зеркальный образ скрученного узла имеет также зеркально отраженный замыкающий элемент (рис. 1б), так что  $\text{Tw}_{-2n}$  – не зеркальный образ  $\text{Tw}_{2n}$ . В [20] узел  $(2n)_1$  – зеркальный образ  $\text{Tw}_{-2n}$ , а узел  $(2n - 1)_2$  топологически эквивалентен  $\text{Tw}_{2n}$ .

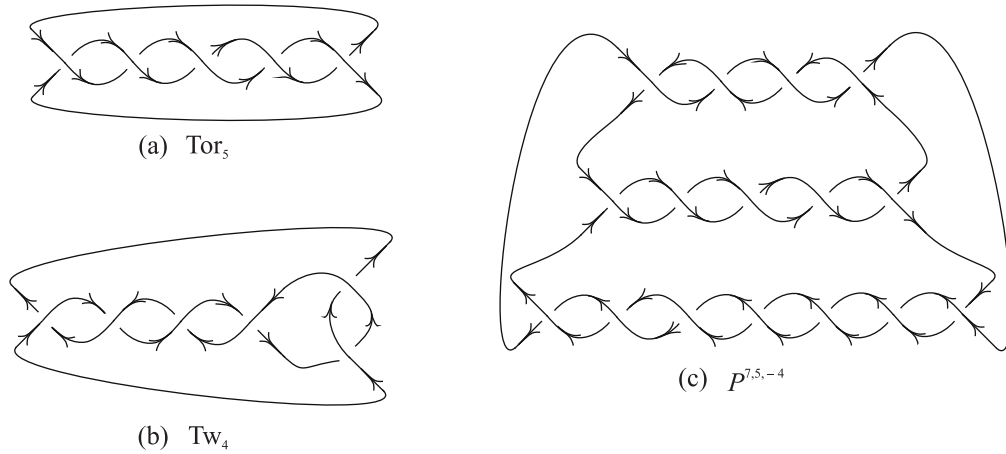


Рис. 1. (а), (b) – Двунитевой торический и скрученный узлы. (с) – Крендельный узел

$|n_i|$  достаточно велики, а полиномы Хованова удовлетворяют

$$Kh^{P_{n_0, \dots, n_g}} = (-t)^a Kh^{P_{n_0 > 0, \dots, n_g > 0}} \quad (4)$$

для некоторого  $a$  в зависимости от области. В частности, в наиболее изученном случае крендельного узла рода 2, полином  $Kh$  в регулярных областях задается как

$$Kh^{P_{n_0, n_1, n_2}} = (-t)^a q^3 \Phi_{n_0, n_1, n_2}(q^2 t),$$

$$\Phi_{n_0, n_1, n_2}(\lambda) = \lambda^{n_0 + n_1} \left\{ F_{n_0} \left( \frac{1}{\lambda} \right) F_{n_1} \left( \frac{1}{\lambda} \right) + F_{\gg_{n_0, n_1}} \left( \frac{1}{\lambda} \right) F'_{n_2}(\lambda) \right\}, \quad (5)$$

где  $F'$  и  $F_{\gg}$  – слегка измененные версии  $F$  из (2):

$$F_n(\lambda) = 1 + \lambda^2 \frac{1 - \lambda^{n-1}}{1 - \lambda},$$

$$F'_n(\lambda) = \lambda^{-1} F_{n-1} + \lambda^n,$$

$$F_{\gg_{n_0, n_1}}(\lambda) = 1 + \lambda + \lambda^2 \frac{1 - \lambda^{n_0-1}}{1 - \lambda} + \lambda^2 \frac{1 - \lambda^{n_1-1}}{1 - \lambda}. \quad (6)$$

С точностью до циклических перестановок ручек кренделя и поворота плоскости проекции на  $\pi$  (на рис. 1с), можно положить  $n_0 \geq n_1 \geq n_2$ . Тогда (5) верно для  $n_0 \geq n_1 \geq n_2 > 0$  (с  $a = 0$ ),  $n_0 \geq n_1 > 0 > -n_1 > n_2$  (с  $a = -1$ ),  $n_0 > -n_1 > 0 > n_1 \geq n_2$  (с  $a = -1$ ),  $0 > n_0 \geq n_1 \geq n_2$  (с  $a = -2$ )<sup>4</sup>.

Полином  $\Phi$  (5) явно положительный для  $n_0 > n_1 > n_2 > 1$ . На самом деле, он явно положительный либо явно отрицательный на всем объединении

<sup>4</sup>Области коразмерности 1 с  $n_i = 0$  или  $n_i = \pm 1$  должны рассматриваться отдельно.

регулярных областей, как можно увидеть из эквивалентных форм (6). Множитель  $(-t)^a$  в (5) тогда делает полином  $Kh$  явно положительным.

Все крендельные узлы во всех областях “гомологически тонкие”, т.е., их полиномы  $KhR_N$  получаются из их полиномов ХОМФЛИ подстановкой  $q^2 \rightarrow -tq^2$ ,  $q^{2N} \rightarrow -tq^{2N}$  [16]. В частности, это предполагает аналитическую зависимость  $KhR_N$  от  $N$ .

*Двунитевой паттерн в сателлитах.* Более сложным случаем являются двунитевые (торические и скрученные) сателлиты (рис. 2). В [17] мы изучили такие сателлиты для торических и скрученных узлов, для простых узлов не более чем с 7 пересечениями, для отдельных узлов с 8–10 пересечениями, а также для торических узлов  $T[3, 5]$  и  $T[3, 7]$ . Теперь множитель с  $\Theta$  возникает как коэффициент перед одним из слагаемых в ответе:

$$(q^3 t)^{-n} Kh^{S_{\text{Tor}_2, n}^{\mathcal{K}}} = Kh^{\text{Tor}_2, n+s} + (q^t)^{-n} \mu \mathfrak{K}^{\mathcal{K}}, \quad (7)$$

$$Kh^{S_{\text{Tw}_n}^{\mathcal{K}}} = Kh^{\text{Tw}_n+s} + (q^t)^{-n} \tau \mathfrak{K}^{\mathcal{K}},$$

где  $\mu = -t^{-1} \frac{1 - q^6 t^3}{1 - q^2 t}$ ,  $\tau = q(1 + q^2 t)\mu$  не зависят от узла, а  $s$  – целочисленный инвариант  $\mathcal{K}^5$ .

В (7)  $\Theta$ -скачки содержатся в  $Kh^{\text{Tor}_2, n+s}$  (2),  $Kh^{\text{Tw}_n+s}$  (3), в то время как функция  $\mathfrak{K}$  – без скачков по  $n$ . Граничное условие при  $t = -1$  для (7) подразумевает, что  $\mathfrak{K}$  лишь немногим отличается от раскрашенного полинома ХОМФЛИ. Таким образом  $\mathfrak{K}$  может быть использован как заместитель раскрашенного полинома  $Kh$  без скачков [17].

**4. Странные катастрофы.** Ниже мы приводим некоторые примеры катастроф, которые мы называем *странными*, – где скачки не имеют вида (2), и

<sup>5</sup>Мы не смогли распознать в  $s$  никакой из известных инвариантов узла.

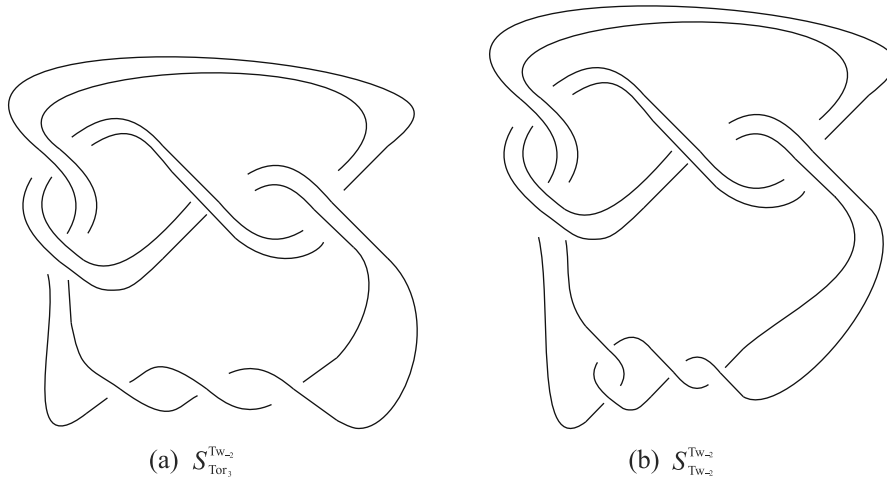


Рис. 2. (а), (б) – Торический и скрученный сателлиты узла-восьмерки

где  $KhR'_N$  из (1) не содержится очевидным образом в  $KhR_N$ .

“Толстые” крендельные узлы Помимо описанных ниже “регулярных” областей<sup>6)</sup>, существуют исключительные области  $-n_1 < n_2 < 0 < n_1 \leq n_0$  и  $n_2 < n_1 < 0 < n_0 < -n_1$ . Скачок полинома  $KhR$  крендельного узла рода два вблизи границы, например, первой исключительной области имеет вид

$$\begin{aligned}
 Kh^{F_{n_0, n_1, n_2}} &= q^3 \Phi_{n_0, n_1, n_2}^{\text{exc}}(q^2 t), \\
 \Phi_{n_0, n_1, n_2}^{\text{exc}}(\lambda) &= \lambda^{n_0 + n_1 + n_2} \times \\
 &\times \left\{ \lambda^{n_2} \Phi^{\text{exc}(1)}(\lambda) + (-t)^{\Theta_{\text{exc}}} \Phi^{\text{exc}(2)}(\lambda) \right\} \quad (8) \\
 \Phi^{\text{exc}(1)} &= F_{n_0 + n_2} \left( \frac{1}{\lambda} \right) \left\{ F_{n_1 + n_2 - 1} \left( \frac{1}{\lambda} \right) + \frac{1}{\lambda} \right\}, \\
 \Phi^{\text{exc}(2)} &= f_{n_2 - 1} \left( \frac{1}{\lambda} \right) F'_{n_2 + 1}(\lambda),
 \end{aligned}$$

где  $f_n(\lambda) = \frac{1 - \lambda^{n-1}}{1 - \lambda}$ , и  $\Theta_{\text{exc}} = \begin{cases} 1, & -\min(n_1, n_2) < n_2 < 0 < n_1, n_2 \\ 0, & \text{иначе} \end{cases}$ .

Здесь нужно обратить внимание на два особых свойства крендельных узлов в исключительных областях. Во-первых, “поправка”  $\Phi^{\text{exc}(2)}$  – это единственный член в  $Kh^{F_{n_0, n_1, n_2}}$ , который содержит  $n_2$  в двух множителях одновременно. В этом смысле<sup>7)</sup>  $\Phi^{\text{exc}(2)}$  и  $Kh^{F_{n_0, n_1, n_2}}$  в исключительной области зависят от  $(q^2 t)^{2n_2}$  вместо  $(q^2 t)^{n_2}$ .

Во-вторых, в исключительных областях крендельные узлы “гомологически толстые”, т.е. их

<sup>6)</sup>И не рассмотренных здесь вырожденных случаев  $\{n_0, n_1, n_2\} \in \{0, \pm 1\}$ .

<sup>7)</sup>Мы называем это явление ускоренной эволюцией в [16].

$KhR_N$  не получаются из соответствующих ХОМ-ФЛИ только лишь подстановкой, которая сохраняет аналитическую зависимость от  $N$  [16]. В согласии с этим, компьютерные вычисления с помощью *KhOca* [22] (применимы, когда одно из  $n_i$  четно) показывают скачок полинома  $KhR_N$  как функции  $N$  между  $N = 2$  и  $N = 3$  (с аналитической зависимостью для  $N \geq 3$ ), для крендельных узлов как рода два, так и старших родов.

Зеркальная симметрия для многонитевых торических и для сателлитных узлов. В [15] полином  $Kh$  для положительной трехнитевой торической косы выражался как функция числа пересечений с двумя ветвями:

$$Kh^{T_{\text{ор}3, 3n+p}}(q, t) = \mathcal{K}_{3, n}^p(q, t), \quad p = 1, 2, n > 0. \quad (9)$$

Хотя полином Хованова обладает зеркальной симметрией по построению [11]:

$$Kh^{\text{Тор}3, 3n+1}(q, t) = Kh^{\text{Тор}3, -3n-1} \left( \frac{1}{q}, \frac{1}{t} \right) \quad (10)$$

– функция  $\mathcal{K}$  ей не обладает. Вместо этого  $\mathcal{K}_{3, n}^1(q, t) = -\frac{1}{t} \mathcal{K}_{3, n}^2 \left( \frac{1}{q}, \frac{1}{t} \right)$ . Начиная с четырех нитей, аналогичные формулы для торических узлов  $T[m, nm + p]$  ( $1 \leq p \leq m - 1$  и взаимно просто с  $m$ ) содержат функцию  $\mathcal{K}_{m, n}^p(q, t)$ , знаконеопределенную для отрицательных  $n$ . Полином  $Kh$  этих узлов задается другой аналитической функцией  $\tilde{\mathcal{K}}_{m, n}^p(q, t)$ , и, например,  $\tilde{\mathcal{K}}_{4, n}^1(q, t) \approx \mathcal{K}_{4, n}^{-1} \left( \frac{1}{q}, \frac{1}{t} \right)$ , и аналогично для большего числа нитей. Кроме того, узлы  $\text{Тор}_{m, \mp 1}$  при  $n = 0$  – тривиальные узлы с  $Kh = 1$ , что не является значением соответствующей аналитической функции ни для положительных, ни для отрицательных  $n$ .

Мы наблюдали аналогичную проблему для тех неторических четырехнитевых узлов, которые являются двунитевыми сателлитами двунитевых узлов,

как и для двунитевых сателлитов скрученных узлов, а также для скрученных сателлитов обоих типов узлов. Явные выражения для положительных и отрицательных узлов даны в [23], и они действительно связаны нетривиально.

Собственные значения для многонитевых торических и для сателлитных узлов. Полиномы  $Kh$  и даже  $Kh_N$  для всех торических узлов содержат зависимость от числа пересечений в виде двунитевого множителя  $f_n(\lambda) = \frac{1-\lambda^n}{1-\lambda}$ . Но чем больше растет число нитей, тем больше возникает собственных значений  $\lambda$  [15]. А именно, для некоторых положительных полиномов  $P_I^\pm(q, t)$  (ниже  $I \in \{\emptyset, 1, 2, 12, 13, 23, 24\}$ ),

$$\boxed{N=2} \quad \Lambda = -q^2 t \tag{11}$$

$$\lambda_1 = q^4 t^2 \mathcal{K}_{2,2n+1} = \Lambda^n \{1 + P^\pm(q, t) f_n(\lambda_1)\}$$

$$\lambda_2 = q^6 t^4 \mathcal{K}_{3,3n\pm 1} = \Lambda^n \{1 + P_1^\pm(q, t) f_n(\lambda_2)\}$$

$$\lambda_3 = q^8 t^6 \mathcal{K}_{4,4n\pm 1} = \Lambda^n \left\{1 + P_1^\pm(q, t) \frac{1}{1-\lambda_1} \times \right.$$

$$\left. \times (P_{12}^\pm(q, t) f_{2n}(\lambda_2) + P_{23}^\pm(q, t) f_n(\lambda_3))\right\}$$

$$n > 0.$$

Однако число собственных значений растет также вместе с рангом калибровочной группы  $N$  при  $n > 2$ . Например,

$$\boxed{N=3} \quad \lambda_4 = q^8 t^5, \quad 3\Lambda = -q^4 t,$$

$$3\mathcal{K}_{4,4n\pm 1} = 3\Lambda^n \left\{1 + P_2^\pm \frac{1}{(1-\lambda_1)^2} f_{2n}(\lambda_2) + P_1^\pm(q, t) \times \right.$$

$$\left. \times \frac{1}{(1-\lambda_1)(1-\lambda_1^2)} (P_{13}^\pm(q, t) f_n(\lambda_3) + P_{24}^\pm(q, t) f_n(\lambda_4))\right\}.$$

$$\tag{12}$$

Четырехнитевые собственные значения также присутствуют в полиномах  $Kh$  для двунитевых торических и скрученных сателлитов торических и скрученных узлов [23].

Таким образом, присутствие экспонент, отличных от  $\lambda = q^2 t$  (катастрофа по  $\lambda$ ), нетривиальное соотношение  $Kh = KhR_2$  и  $KhR_3$  (катастрофа по  $N$ ) и странная катастрофа (по числу пересечений  $n$ ), связанная с нетривиальной зеркальной симметрией полинома  $KhR_N$ , – для одного и того же узла – как будто имеют нечто общее друг с другом.

**5. Заключение.** Основываясь на примерах выше, мы различаем два вида катастроф полиномов  $KhR_N$  относительно вида скачка в аналитическом выражении для  $KhR_N$ . Катастрофы, которые мы называем регулярными, приводят к скачку (1) с положительными полиномами  $KhR'_N$  и  $KhR''_N$  (которые в этом смысле содержатся в  $KhR_N$  во всем пространстве параметров). Более того,  $KhR''_N$  составлен из полиномов  $KhR_N$  для двунитевой косы, единственный скачок в каждом из которых происходит

при  $N = 0$  и необходим, чтобы обеспечить положительность полинома  $KhR_N$  [15–17]. Мы предполагаем, что регулярные катастрофы случаются, когда комплекс  $KhR_N$  содержит подкомплекс для положительной двунитевой косы, и он “переключается” в подкомплекс для отрицательной двунитевой косы [24, 25].

Другие катастрофы, которые мы называем странными, приводят к скачкам, где полиномы  $KhR'_N$  и  $KhR''_N$  в (1) не обязательно положительные [15–17] (в отличие от  $KhR_N$ ). Более того, аналитическая зависимость полиномов  $KhR_N$  от параметров семейства узлов может всерьез различаться по обе стороны скачка. Такие скачки случаются, когда аналитическая зависимость содержит экспоненты  $\lambda_k^{n_i}$  с  $\lambda_k$ , отличными от двунитевого значения  $\lambda = q^2 t$ . Например, новые  $\lambda_k$  появляются в двунитевых множителях  $f_n(\lambda_k)$  в наших формулах для торических узлов с более чем двумя нитями, а также из члена  $F_{n_2}(q^2 t) F'_{n_2}(q^2 t) \sim (q^4 t^2)^{n_2} + \dots$  в наших формулах для “толстых” крендельных узлов. Наиболее удивительно, что полиномы  $KhR_N$  вблизи странной катастрофы имеют скачки в аналитической зависимости от  $N$  для некоторого  $N = N_0$ . Более того, мы предполагаем здесь наличие подкомплекса (комплекса  $KhR_N$ ), который является не двунитевым, но является периодическим, и содержит отображения, вырождающиеся при некоторых значениях  $N$ . “Схлопывание” такого подкомплекса и вызывает странную катастрофу  $KhR_N$ .

Наша следующая цель таким образом состоит в изучении комплексов  $KhR_N$  для обсуждавшихся здесь семейств узлов, особенно когда для них случаются катастрофы. Мы ожидаем, что это поможет нам как понять уже обнаруженные явления, так и сделать новые предсказания для более общих семейств узлов.

Мы надеемся, что наш подход даст новые инструменты для построения и изучения ККТП, как и для того, чтобы сделать гомотопические инварианты узлов более прозрачными через их интерпретацию как наблюдаемых в ККТП.

**Финансирование работы.** Работа была поддержана фондом развития теоретической физики и математики “Базис”, грант PostDoc-22-1-3-34-1.

**Конфликт интересов.** Автор не имеет конфликта интересов.

1. A. S. Anokhina. Phys. Part. Nucl. **51**(2), 223 (2020) [Phys. Part. Nucl. **51**, 172 (2020)].
2. J. M. F. Labastida, AIP Conf. Proc. **484**, 1 (1999); arXiv: 9905057 [hep-th].

3. N. Kolganov, S. Mironov, and Andrey Morozov; Nucl. Phys. B **987**, 116072 (2023); arXiv: 2105.03980 [hep-th].
4. V.I. Arnold, *Catastrophe theory*, Berlin Heidelberg, Springer (1992), p. XIII, 150.
5. V. Dolotin and A. Morozov, *The universal Mandelbrot set. Beginning of the story*, World Scientific, New Jersey (2006), p. 162.
6. S.I. Gelfand and Yu.I. Manin, *Methods of Homological Algebra*, Springer, Berlin (1994), p. 222.
7. M. Stosic and S. Gukov, *Geometry & Topology Monographs* **18**, 309 (2012); arXiv: 1112.0030 [hep-th].
8. S. Gukov, A. Schwarz, and C. Vafa, *Lett. Math. Phys.* **74**, 53 (2005); arXiv: 0412243 [hep-th].
9. D. Galakhov, *JHEP* **05**, 085 (2019); arXiv: 1702.07086 [hep-th].
10. A. Anokhina, *Adv. Theor. Math. Phys.* **33**(6), 1850221 (2018); arXiv: 1710.07306 [hep-th].
11. M. Khovanov, *Duke Math. J.* **101**, 359 (2000); arXiv: 9908171 [math.QA].
12. D. Bar-Natan, *Algebr. Geom. Topol.* **2**, 337 (2002); arXiv: 0201043 [math.QA].
13. M. Khovanov and L. Rozansky, *Fund. Math.* **199**, 1 (2008); arXiv: 0401268 [math.QA].
14. N. Carqueville and D. Murfet, *Algebr. Geom. Topol.* **14**, 489 (2014); arXiv: 1108.1081 [hep-th].
15. A. Anokhina and A. Morozov, *JHEP* **1804**, 066 (2018); arXiv: 1802.09383 [hep-th].
16. A. Anokhina, A. Morozov, and A. Popolitov, *Eur. Phys. J. C* **79**, 867 (2019); arXiv: 1904.10277 [hep-th].
17. A. Anokhina, E. Lanina, and A. Morozov, *Nucl. Phys. B* **998**, 116403 (2024); arXiv: 2308.13095 [hep-th].
18. A. Morozov and A. Smirnov, *Nucl. Phys. B* **835**, 284 (2010); arXiv: 1001.2003 [hep-th].
19. A. Mironov, A. Morozov, and An. Morozov, *AIP Conf. Proc.* **1562**, 123 (2013); arXiv: 1306.3197 [hep-th].
20. D. Bar-Natan, M. Scott, *The Knot Atlas*; url: <http://katlas.org>.
21. P. Dunin-Barkowski, A. Popolitov, and S. Popolitova, *Int. J. Mod. Phys. A* **37**(36), 2250216 (2022); arXiv:1812.00858 [math-ph].
22. L. Lewark, *Knot software*; <http://lewark.de/lukas/software.html>.
23. A. Anokhina, A. Morozov, and A. Popolitov. *Int. J. Mod. Phys. B A* **36**(34n35), 2150243 (2021); arXiv:2104.14491 [hep-th].
24. V. Dolotin and A. Morozov, *Nucl. Phys. B* **878**, 12 (2014); arXiv: 1308.5759 [hep-th].
25. A. Anokhina and A. Morozov, *JHEP* **07**, 063 (2014); arXiv: 1403.8087 [hep-th].



# Открытие новых окон в раннюю Вселенную с помощью многоканальной астрономии (Мини-обзор)

Е. В. Арбузова<sup>a,b</sup>, К. А. Долгих<sup>a,c</sup>, А. Д. Долгов<sup>a,d1)</sup>, О. Е. Калашёв<sup>a,c</sup>, А. А. Корочкин<sup>a,e</sup>, Л. А. Панасенко<sup>a</sup>,  
Н. А. Поздняков<sup>a</sup>, Г. И. Рубцов<sup>a,c</sup>, А. С. Руденко<sup>a,f</sup>, И. И. Ткачёв<sup>a,c</sup>

<sup>a</sup>Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия

<sup>b</sup>Государственный университет “Дубна”, 141983 Дубна, Россия

<sup>c</sup>Институт ядерных исследований РАН, 117312 Москва, Россия

<sup>d</sup>Объединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Россия

<sup>e</sup>Université Libre de Bruxelles, CP225 Boulevard du Triomphe, 1050 Brussels, Belgium

<sup>f</sup>Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 21 ноября 2023 г.

После переработки 29 февраля 2024 г.

Принята к публикации 29 февраля 2024 г.

В настоящее время в двух тесно связанных между собой областях фундаментальной физики, космологии и физике элементарных частиц, сложилась уникальная ситуация. Стандартная модель (СМ) физики частиц прекрасно описывает все имеющиеся экспериментальные данные, кроме осцилляций нейтрино. Примерно то же самое можно сказать и о стандартной космологической модели, сравнение которой с астрономическими наблюдениями, говорит, что мы хорошо понимаем законы эволюции Вселенной от ее “рождения” до наших дней. Однако для понимания механизмов большого ряда космологических явлений определенно требуется выход за рамки СМ. Сюда в первую очередь относятся проблемы темной материи и темной энергии, генерации барионной асимметрии Вселенной и установления механизма инфляционного расширения. К числу менее известных, но тоже весьма важных проблем, базирующихся на основе обычной космологии и астрофизики, относятся проблема возникновения космических магнитных полей и недавно возникшая проблема существования во Вселенной массивных черных дыр в количестве, намного превышающем ожидания. Для понимания и возможного решения этих проблем очень важно проникнуть как можно глубже во Вселенную, получив данные о физических процессах на как можно более ранних стадиях космологической эволюции. Мощным методом для этого являются многоканальные (multi-messenger) наблюдения, использующие для этого все возможные каналы (“окна”): помимо традиционных наблюдений электромагнитного излучения во всех диапазонах длин волн и всех типов космических лучей, в последнее время открывается новое окно — наблюдения гравитационных волн. В наших работах, выполненных в рамках гранта Российского научного фонда # 20-42-09010 “Открытие новых окон в раннюю Вселенную с помощью многоканальной астрономии”, был проведен комбинированный анализ информации, полученной на основе различных астрономических данных. В частности, было проведено исследование характеристик космических магнитных полей и возможных механизмов их возникновения, а также исследование наблюдаемых проявлений первичных черных дыр на основе данных о гравитационных волнах, наблюдаемых на интерферометрах LIGO/Virgo/KAGRA.

DOI: 10.31857/S1234567824070024, EDN: VPILQH

**1. Введение.** Астрономические наблюдения как современной, так и достаточно ранней Вселенной стали мощным средством проверки фундаментальной физики, более того, они явно свидетельствуют в пользу Новой физики за рамками Стандартной мо-

дели. Весьма вероятно, что астрономические наблюдения в ближайшее время приведут к новым фундаментальным открытиям. Эти ожидания подкрепляются, в частности, регистрацией гравитационных волн от слияния пар черных дыр с массами от десяти до сотни масс Солнца [1], которая стала доступна в последние годы. Проведенный нами анализ убедит-

<sup>1)</sup>e-mail: dolgov@nsu.ru

тельно свидетельствует о том, что одним из источников гравитационных волн могут являться первичные черные дыры [2]. Обнаружение первичных черных дыр позволяет “заглянуть” в раннюю Вселенную в период их образования, что, в частности, помогает значительно глубже понять законы эволюции Вселенной, начиная с очень ранней дозвездной эпохи.

Центральная задача нашего исследования состояла в изучении двух, на наш взгляд, взаимосвязанных космологических проблем, а именно происхождения космических магнитных полей и возможной природы темной материи. В последнем направлении мы сконцентрировались на старой, но недавно ставшей популярной гипотезе, что носителями темной материи (частично или полностью) являются первичные черные дыры [3, 4]. В этом случае космологическая плотность черных дыр должна быть весьма значительна и велика вероятность образования их двойных систем, излучающих гравитационные волны. Переход гравитационных волн в электромагнитные во внешнем магнитном поле приведет к потенциально наблюдаемым всплескам электромагнитного излучения, как показано в работе [5].

Очень важным предсказанием теории является логнормальный спектр масс первичных черных дыр:

$$\frac{dN}{dM} = \mu^2 \exp \left\{ -\gamma \ln^2 \frac{M}{M_0} \right\}. \quad (1)$$

Теория позволяет определить  $M_0$  – величину центральной массы распределения,  $M_0 \sim 10M_\odot$ , где  $M_\odot$  – масса Солнца [6].

Космические магнитные поля и первичные черные дыры (особенно большой массы) объединяет, в частности, то обстоятельство, что и те и другие могут быть порождены в результате процессов, происходящих во Вселенной на постинфляционной стадии. Эта взаимосвязь может привести к установлению механизма инфляции. Например, она позволит различить, является ли движущей силой инфляции скалярное поле – инфлатон, или же инфляция создается модификацией гравитационного взаимодействия за счет добавления к действию Гильберта–Эйнштейна дополнительного нелинейного по кривизне слагаемого  $R^2$ , так называемой *инфляцией Старобинского* [7]:

$$S = -\frac{M_{Pl}^2}{16\pi} \int d^4x \sqrt{-g} \left[ R - \frac{R^2}{6M_R^2} \right], \quad (2)$$

где  $M_{Pl} \approx 1.22 \times 10^{19}$  ГэВ – планковская масса, а  $M_R$  – постоянный параметр с размерностью массы. В этом случае амплитуда реликтовых гравитационных волн оказывается сильно подавленной в согласии с

наблюдениями. Заметим, что модель  $R^2$ -инфляции не единственная, которая приводит к подавлению тензорных мод, но общее обсуждение инфляционных теорий не входит в задачу нашего обзора.

Наличие в действии слагаемого, нелинейного по скаляру кривизны, приводит к дополнительной скалярной степени свободы в гравитации. Соответствующая степень свободы получила название *скалярон*. В теории, реализуемой в рамках модифицированной  $R^2$ -гравитации, постинфляционный разогрев Вселенной происходил за счет гравитационного рождения элементарных частиц осцилляциями скаляронного поля. Нами были вычислены вероятности рождения частиц и показано, что при таком механизме разогрева возможно существование частиц темной материи с силой взаимодействия, типичной для суперсимметрии, но с массами, значительно выше предела, полученного на Большом адронном коллайдере (БАК) [8, 9]. Подчеркнем, что в канонической космологии результаты БАК, которые, возможно, исключают суперсимметрию на ТэВной шкале, вообще запрещают существование суперсимметрии на любых энергетических масштабах выше ТэВ, так как предсказанные в суперсимметричных теориях стабильные суперпартнеры обычных частиц имели бы космологическую плотность энергии, существенно превышающую критическую. Однако наши результаты показывают, что в  $R^2$ -теории суперсимметрия возможна и на сверхвысоких энергиях. Отметим, впрочем, что как упоминается в наших работах, данные БАК не исключают суперсимметрию на ТэВных энергиях, но лишь существенно ограничивают разрешенный диапазон параметров. Таким образом, нами представлен альтернативный вариант “спасения” суперсимметрии.

Накопленные к настоящему времени астрономические данные, особенно в наблюдениях орбитальных телескопов “Хаббл” [10–12] и “Джеймс Уэбб” [13–16], а также ALMA, см., например, [17], привели к удивительному выводу о необычайно плотной заселенности ранней Вселенной галактиками и сверхмассивными черными дырами (квазарами) на красных смещениях  $\sim 10$ . Более того и в современной Вселенной количество черных дыр с массами от доли масс Солнца до миллиона солнечных масс гораздо выше, чем предполагалось ранее на основании общепринятой космологии и астрофизики, см. обзор [18].

В действительности проблемы неожиданно высокой заселенности Вселенной объектами неясного происхождения (возможно, черными дырами) стали известны намного раньше. Например, с помощью гравитационного микролинзирования были обна-

ружены объекты с массами около 0.5 массы Солнца, так называемые МАСНО [19, 20]. Их количество значительно превышает возможное количество невидимых красных карликов. Обзор проблемы МАСНО можно найти, например, в работах [21, 22]. Кроме того, на интерферометрах LIGO/Virgo/KAGRA наблюдают черные дыры с массами от нескольких десятков до сотни масс Солнца. Наконец, наблюдают сверхмассивные черные дыры с массами выше миллиона масс Солнца (в центрах практически всех галактик) и черные дыры промежуточной массы от тысячи до ста тысяч масс Солнца. В обзоре [18] приведены данные наблюдений и сделан вывод, что, весьма вероятно, все эти черные дыры являются первичными.

Интересно отметить, что наблюдаемое количество черных дыр хорошо описывается логнормальным спектром масс первичных черных дыр (1). В литературе приведено большое количество различных механизмов рождения первичных черных дыр с сильно различающимися спектрами масс. Однако данная область исследований является очень значительной по объему и поэтому на ее анализе мы здесь не будем останавливаться.

Как известно, в галактиках существуют магнитные поля с напряженностью порядка мкГс, кроме того имеются серьезные указания на межгалактические магнитные поля, возможно, с напряженностью вплоть до нГс (обсуждение этих вопросов можно найти в работе [23]). Магнитные поля существуют также во всех астрономических объектах, планетах (как известно, Земля имеет ненулевое магнитное поле), в звездах (от небольших магнитных полей в звездах типа Солнца до гигантских полей в звездах типа магнетаров), в галактиках и даже в межгалактической среде, где магнитные поля могут сохранять свои начальные первичные свойства. Повсеместное наличие магнитных полей во Вселенной позволяет полагать, что черные дыры находятся во внешнем магнитном поле. Эти космические магнитные поля различной природы доступны для изучения методами “многоканальной” (multi-messenger) астрономии. Исследование наблюдаемых проявлений космических магнитных полей и первичных черных дыр открывает новое окно в раннюю Вселенную (в частности, на основе результатов цитируемой выше работы [5]).

**2. Межгалактические магнитные поля, гамма-астрономия и космические лучи высоких энергий.** Механизм генерации крупномасштабных магнитных полей в ранней Вселенной, строго говоря, неизвестен, но наличие наблюдаемых в настоящее время межгалактических магнитных

полей убедительно говорит об их существовании в ранней Вселенной, см. обзор [23]. Характерные напряженности полей вдали от центров скоплений в современной Вселенной также наблюдательно не известны, но их понимание чрезвычайно важно для таких задач как, например, поиск источников космических лучей сверхвысоких энергий. В рамках исследования этих проблем нами была рассмотрена задача о росте первичных неоднородностей в ранней Вселенной и законов, описывающих совместную эволюцию темной материи, барионов и магнитных полей.

С этой целью в первую очередь проводилась разработка программного обеспечения, моделирующего рост первичных неоднородностей в ранней Вселенной. Расчеты были проведены следуя подходу, основанному в [24], его современное развитие см., например, в [25]. Разработанный код воспроизводит структуры в сфере радиусом 200 Мпк от нашей Галактики и с пространственным разрешением 2 Мпк. Для отслеживания распределения вещества в ближайшей Вселенной использовался каталог галактик 2M+++. Далее нами проводилась работа над созданием кода, который совместно с BORG [26, 27] описывал бы также и эволюцию барионной компоненты и магнитных полей, воспроизводя наблюдаемые температуры межзвездного газа и напряженности магнитных полей в центрах галактических скоплений пообъектно в локальной Вселенной. Численное моделирование образования структур в локальной космологической окрестности и связанных с ними магнитных полей проводилось в двух подходах.

В первом подходе мы использовали аналитическое моделирование магнитных полей. Предполагалось, что зародыши магнитных полей формируются в раннюю космологическую эпоху, в какой конкретно модели несущественно. Магнитное поле в этом случае заполняет все области Вселенной. Далее напряженность поля падает с расширением Вселенной и растет вместе с контрастами плотности вещества. Есть два различных механизма роста поля. Первый – следствие адиабатического сжатия. С точки зрения магнитной гидродинамики (МГД) это линейный эффект. Результирующая напряженность в зависимости от контраста плотности материи подчинена степенному закону “2/3”, находится под контролем и может быть восстановлена по известному из наблюдений распределению вещества. Этот механизм доминирует в областях войдов и филаментов. В структурах с высокой плотностью (например, в центрах скоплений галактик) важны и специфические эффекты МГД, такие как нелинейная

эволюция нестабильностей Кельвина–Гельмгольца. Такие эффекты сложно моделировать и ответ может зависеть от деталей численного подхода. Поэтому здесь мы ограничились адиабатическим сжатием поля. Использование результатов моделирования на основе кода BORG и такого подхода позволило нам построить трехмерную модель магнитного поля, соответствующую наблюдаемой крупномасштабной структуре в достаточно большой окрестности Вселенной. Полученные результаты должны быть верны в областях малой плотности, занимающих большую часть объема Вселенной. Результаты этого моделирования магнитных полей были использованы для расчета чувствительности гамма-телескопов к зондированию достаточно больших первичных магнитных полей,  $B > 10^{-12}$  Гс. Это задает типичную величину поля в войдах вне редких там структур, и поэтому совпадает с напряженностью первичного поля в современную эпоху. При этом пространственное разрешение контрастов плотности составляло  $2.64 h^{-1}$  Мпк, где  $h$  – безразмерная постоянная Хаббла,  $h \equiv H/(100 \text{ (км/с)}/\text{Мпк})$ . Исследуемая структура простиралась вплоть до положения галактики Mkn 501, являющейся блазаром, т.е. она содержит активное ядро (сверхмассивную черную дыру) с исходящей струей ускоренных частиц, направленной в сторону Земли. Эта галактика является переменным источником гамма-лучей и находится от нас на расстоянии 140 Мпк. Также предполагалось турбулентное распределение магнитного поля с корреляционной длиной от 1 кпк. Первичные космологические магнитные поля с такой маленькой корреляционной длиной  $\lambda_B$  возникают, например, в моделях с фазовыми переходами [28]. Имеет место следующее эволюционное соотношение  $\lambda_B \sim 0.1 [B/(10^{-12} \text{ Гс})]$  кпк для турбулентных космологических магнитных полей в современной Вселенной [29]. С другой стороны, поле, генерируемое в эпоху инфляции, может иметь очень большую корреляционную длину, вплоть до современных масштабов Хаббла [30].

Второй подход – это сочетание численного моделирования крупномасштабной структуры кодом BORG и численного моделирования магнитогидродинамики. Для этого адаптировался к условиям нашей задачи и имеющемуся программному обеспечению один из лучших на сегодняшний день МГД-кодов – RAMSES [31]. Была промоделирована область куба 100 Мпк вокруг источника Mkn 501. Эта область включает большую пустоту, в которой находится активная галактика – блазар Mkn 501, а также окружающие ее структуры. Были получены карты магнитных полей с различными начальными усло-

виями, которые задавались при достаточно большом красном смещении, в линейную эпоху для космологических возмущений. Совместно с французскими коллегами также проводилась работа над построением реалистичных трехмерных карт напряженностей магнитного поля во всем пространстве, учитывая войды и филаменты. Карты строились магнитогидродинамическим кодом RAMSES-MHD [32] с использованием начальных условий BORG, что позволяет воспроизводить положения всех крупных структур и скоплений в локальной Вселенной в радиусе 200 Мпк вокруг Галактики. Это позволило использовать данные карты для исследования магнитного поля методами гамма-астрономии [33, 34].

Распространение гамма-излучения в космологической среде приводит к развитию электромагнитных каскадов. Эти процессы являются ключевыми в интерпретации наблюдений в гамма-астрономии. В работе [35] выполнено детальное сравнение точности моделирования электромагнитных каскадов в межгалактическом пространстве публично доступными Монте-Карло программами CRbeam [36, 35], CRProa 3.1.7 [37] и ELMAG 3.0.2 [38]. После устранения найденных ошибок были выпущены новые версии программ CRProa 3.2 и ELMAG 3.0.3, и теперь все три кода демонстрируют согласие с точностью 10 % при моделировании близких источников с красными смещениями  $z \sim 0.1$ .

Первичное магнитное поле, если оно присутствовало в эпоху рекомбинации и реионизации, может разрешить противоречие между различными измерениями константы Хаббла и  $\sigma_8$  [39], а также объяснить пониженную прозрачность для линии 21 см при красном смещении  $15 < z < 20$  [40]. Такое магнитное поле может сохраниться до настоящего времени в войдах крупномасштабной структуры. В рамках механизма, предложенного в работе [39], напряженность внегалактического магнитного поля в войдах составит сегодня 1–10 пГс. С другой стороны, комбинации данных черенковских телескопов нынешнего поколения HESS, MAGIC и VERITAS с данными телескопа Fermi-LAT в настоящее время уже исключают поля в войдах с напряженностями меньшими, чем порядка  $10^{-15}$  Гс [41, 42]. Возможность детектирования или исключения более сильных полей с помощью наблюдений ближайшего блазара с жестким спектром телескопами нового поколения CTA (Cherenkov Telescope Array, Массив черенковских телескопов) изучалась в работе [33], и было продемонстрировано, что наблюдения в гамма-лучах позволят детектировать магнитные поля величиной  $10^{-14}$ – $10^{-11}$  Гс. Таким образом, комбинация ограничений из данных

по микроволновому фону и гамма-лучам от блазаров [33, 39, 40] в будущем будет покрывать полный диапазон возможных космологических магнитных полей  $10^{-15}$ – $10^{-9}$  Гс и позволит проверить гипотезу об их связи с современными магнитными полями и их влиянии на эпохи рекомбинации и реионизации.

В работе [33] также изучалась возможность детектирования космологических магнитных полей, образовавшихся во время инфляции, на основе данных гамма-обсерватории нового поколения СТА. Соответствующее магнитное поле обладает большой корреляционной длиной, которая приводит к характерной угловой асимметрии вторичного гамма-излучения, скоррелированной между различными источниками на небе. Необходимым условием для надежной регистрации таких полей с напряженностью в диапазоне  $10^{-14}$ – $10^{-12}$  Гс является достаточная яркость источника гамма-излучения на энергиях выше 30 ТэВ. В таком случае становится существенной локальная структура вокруг источника, которая может значительно ослабить каскадный сигнал. Локальная структура вблизи источников и отбор блазаров, подходящих для задачи детектирования инфляционных магнитных полей, производились с использованием построенных нами реалистичных карт магнитных полей. В результате анализа мы показали, что блазары Mrk501, Mrk421 и 1ES 1959+650 могут быть использованы для надежного детектирования инфляционных магнитных полей обсерваторией СТА в указанном выше диапазоне напряженностей в современную эпоху,  $10^{-14}$  Гс  $\lesssim B \lesssim 10^{-12}$  Гс [33].

Обычно грубо предполагается, что средняя амплитуда магнитного поля является постоянной вдоль всего луча зрения от источника до наблюдателя. В таком упрощенном подходе не учитываются неоднородности магнитного поля, связанные с крупномасштабной структурой Вселенной, и неоднородности, вызванные звездообразованием и активностью галактических ядер. Ограничения снизу на характерную напряженность магнитного поля в войдах вытекают из отсутствия вторичного гамма-излучения от блазаров. В упрощенном подходе остается неясным ключевой момент, какое магнитное поле отвечает за подавление вторичного потока гамма-лучей: космологическое магнитное поле, заполняющее войды, или же астрофизические магнитные поля из скоплений и филаментов. Поэтому в таком подходе существующие ограничения на межгалактические поля не имеют достаточных оснований.

Мы исследовали [34] распространение электромагнитных каскадов от ТэВных гамма-источников

в построенных реалистичных моделях межгалактического магнитного поля, используя результаты магнитогидродинамических космологических симуляций IllustrisTNG. В таких симуляциях войды могут быть “загрязнены” магнитным полем в рамках модели барионной обратной связи как результат процессов, возвращающих вещество из галактик в межгалактическую среду. Мы показали, что для большинства источников астрофизические магнитные поля скоплений и филаментов вызывают энергонезависимое подавление вторичного потока гамма-лучей на уровне около 10–15%. В этом случае магнитные поля  $B > 10^{-12}$  Гс достаточно сильно отклоняют заряженные частицы, рождающиеся во вторичных каскадах, и вторичный поток гамма-квантов подавлен во всем его энергетическом диапазоне. Это меняет общую нормировку вторичного излучения, но мало влияет на его форму. Напротив, первичное магнитное поле войдов ( $B < 10^{-12}$  Гс) изотропизует направления только низкоэнергетических электронов и позитронов, полностью подавляя соответствующую часть спектра. Это дает сигнатуру и метод регистрации первичных магнитных полей в войдах. Исключение составляет особый случай, когда первичный источник гамма-излучения имеет жесткий собственный спектр с максимумом в диапазоне энергий выше 50 ТэВ. Если такой источник находится внутри крупного скопления галактик, то пузырь магнитного поля, образовавшийся вокруг скопления, может вызывать подавление до 50% каскадного сигнала [34].

В работе [43] проведен анализ гамма-излучения блазара с жестким спектром 1ES 0229+200 с целью поиска каскадного сигнала для получения наиболее модельно независимых ограничений на межгалактическое магнитное поле. Были проанализированы самые последние наблюдения MAGIC за пятилетний период, а также прошлые наблюдения источника телескопами H.E.S.S. и VERITAS. В дополнение к ним были использованы данные 12 лет наблюдений обсерваторией Fermi/LAT. На основе этих данных была установлена эволюция блеска источника в диапазоне ГэВ–ТэВ за полтора десятилетия. Мы обнаружили, что поток источника в диапазоне энергий выше 200 ГэВ колеблется вокруг своего среднего значения за 14-летний период наблюдений. В диапазоне энергий 1–100 ГэВ, доступном для Fermi/LAT, наоборот, не обнаружено свидетельств изменчивости потока. Далее мы провели моделирование каскадного сигнала с использованием Монте-Карло программ CRbeam и CRProa, чтобы предсказать интенсивность вторичного потока гамма-излучения от источника, на основе его переменности в ТэВном диапазоне для раз-

личных значений напряженности и корреляционной длины магнитного поля. Необнаружение переменности источника в диапазоне  $1 - 100$  ГэВ из-за вторичного гамма-излучения, накладывает нижнюю границу  $B > 1.8 \times 10^{-17}$  Гс для магнитных полей с большой корреляционной длиной, возникающих в моделях инфляции, и  $B > 10^{-14}$  Гс для полей космологического происхождения, которые не могут иметь корреляционную длину большую, чем космологический горизонт в соответствующую эпоху, например, возникающих в фазовых переходах, см. рис. 5 в [43] и ссылки там же на различные модели происхождения магнитных полей. Несмотря на то, что это ограничение слабее, чем полученное ранее из анализа данных Fermi/ LAT [42], наше ограничение является более надежным, поскольку оно основано на консервативной оценке собственного спектра источника и учитывает детали изменчивости его блеска в диапазоне энергий ГэВ–ТэВ.

В работе [44] исследовано распространение космических лучей ультравысоких энергий (КЛУВЭ) в стохастических межгалактических магнитных полях с колмогоровским спектром. Впервые рассмотрена трехмерная картина отклонений протонов, распространяющихся расходящимся пучком от источника. Было обнаружено неизвестное ранее явление: даже если КЛУВЭ излучаются источником изотропно, они распределяются существенно анизотропно на расстоянии порядка ларморовского радиуса. При этом изотропное распределение восстанавливается снова на расстоянии порядка десяти ларморовских радиусов. Такое поведение возникает в промежуточном режиме между кинематическим распространением в однородном магнитном поле и диффузией на расстояния, много большие, чем корреляционная длина. Возникающее в этом новом режиме анизотропное распределение частиц на сфере образует нитевидную, каустикоподобную структуру. Угловой масштаб этих областей зависит от параметров и структуры магнитного поля в радиусе нескольких корреляционных длин вокруг источника.

В работе [45], являющейся продолжением исследования [44], изучено изображение источника с точки зрения наблюдателя в нитевидной структуре. Для этого были произведены доработки программного пакета CRbeam, а именно: возможность запуска джета с заданным углом и направлением, а также добавление наблюдателя с заданными параметрами. Вне нитевидной структуры наблюдатель будет видеть ослабление потока. По предварительным результатам ослабление может быть более чем в сто раз. С другой стороны, наблюдатель в нити или сплетении

нитей наблюдает усиление потока КЛУВЭ в десятки раз. Кроме того, в зависимости от своего положения в нитевидной структуре наблюдатель видит источник искаженным (вытянутым перпендикулярно направлению нити) и смещенным относительно истинного направления. Проведено исследование внешнего вида источника в зависимости от спектра энергий частиц. Показано, что наблюдаемые в Telescope Array особенности распределения по направлению типа горячих пятен могут быть естественным следствием распространения в межгалактических магнитных полях.

### 3. Теоретические результаты.

*3.1. Распространение гравитационных волн.* В работе [46] выведено общее уравнение, описывающее распространение гравитационных волн (ГВ) в произвольной метрике и с ненулевым фоновым тензором энергии-импульса (ТЭИ), а также с учетом поправок первого порядка по возмущению к ТЭИ. Данное уравнение в общем виде является отправной точкой для решения широкого круга задач, позволяя сделать некоторые качественные выводы еще на этапе их формулировки. Например, нарушение аксиальной симметрии задачи вследствие наличия, помимо направления распространения ГВ, дополнительной выделенной оси приводит к смешиванию мод возмущений метрики.

Отметим также, что, несмотря на рассмотрение в некоторых работах распространения возмущений метрики на фоне пространств, отличающихся от конформно-плоского, и с нетривиальными поправками к ТЭИ (см., например, [47, 48]), уравнение движения в общем случае фонового пространства и фонового ТЭИ с поправками не было записано в статьях и монографиях других авторов. И, соответственно, анализ такого общего уравнения не проводился. Между тем задачи о возмущениях метрики можно разделить на два больших класса – задачи с изотропным и с анизотропным фоновым пространством. Во втором случае разделение метрических возмущений на независимые моды невозможно. Именно поэтому акцент на смешивании мод возмущений метрики не ставится, например, в работах, где рассмотрены метрические возмущения над фоновым пространством Бьянки [49, 50]. Наша же работа расширяет круг возможных задач о распространении и эволюции гравитационных волн и возмущений метрики в целом. Она подразумевает возможность рассмотрения задач, в которых осуществляется, например, переход гравитационных волн из изотропных областей в пространстве в область с локальной анизотропией, связанной с присутствием массивных аст-

рофизических объектов. Таким образом, после прохождения области с анизотропией гравитационная волна может затухнуть или усилиться. Возможно, в каких-то задачах важна сама порождаемая скалярная мода метрических возмущений. Примеров таких задач из космологии и астрофизики множество: распространение гравитационной волны в окрестности заряженной вращающейся черной дыры, либо в окрестности магнетара и др.

В последующей работе [51], с использованием результатов [46], нами была получена система уравнений для конверсии ГВ в электромагнитные волны под действием магнитного поля на фоне произвольного искривленного пространства-времени. Целью исследования являлась оценка влияния эффекта конверсии под действием космологического магнитного поля на амплитуду длинноволновых реликтовых ГВ. Для проведения оценки сверху, мы переписали данную систему уравнений для случая метрики Фрийдмана–Леметра–Робертсона–Уокера и ввели ряд упрощающих приближений: однородность фонового магнитного поля, малость гравитации от космологического магнитного поля по сравнению с гравитацией фона материи, независимость коэффициента в эффективном действии Гейзенберга–Эйлера от температуры, ортогональность волнового вектора ГВ к вектору магнитного поля. Также было учтено взаимодействие рождающихся фотонов с первичной плазмой.

Итоговая система уравнений разбилась на две независимые части для двух поляризаций начальной гравитационной волны. Первая подсистема была решена численно в течение эпохи радиационного доминирования (РД) для современного значения напряженности магнитного поля  $B_0 = 1$  нГс (напомним, что при движении вспять во времени напряженность магнитного поля растет как обратный квадрат масштабного фактора) для частот реликтовых ГВ,  $10^{-16}$ – $10^{-18}$  Гц. В результате решения было получено, что к концу РД-стадии амплитуды ГВ данных частот были подавлены на величину порядка 0.01%. Был сделан вывод, что эффект конверсии реликтовых ГВ в электромагнитные волны под действием космологического магнитного поля незначительно влияет на амплитуду длинноволновых реликтовых ГВ. В дальнейшем будет решена вторая часть системы уравнений, где происходит переход тензорной моды возмущений метрики не только в электромагнитные волны, но и в скалярную моду возмущений метрики.

*3.2. Рождение сверхтяжелых частиц темной материи и космические лучи высоких энергий.* В

работе [52] была вычислена вероятность рождения сверхтяжелых частиц темной материи с массами, близкими к массе скалярона  $M_R \simeq 3 \times 10^{13}$  ГэВ, и силой взаимодействия, типичной для суперсимметрии. Авторы показали, что аннигиляция этих частиц в сгустках темной материи может привести к наблюдаемому вкладу в поток космических лучей сверхвысоких энергий. Другим, также эффективным источником космических лучей сверхвысоких энергий является аннигиляция в системе гравитационно связанной пары этих сверхтяжелых частиц. Был сделан вывод, что сверхтяжелые частицы суперсимметричного типа в  $R^2$ -теории являются реалистичными кандидатами на роль носителей темной материи. Их распады или аннигиляция будут давать вклад в поток космических лучей сверхвысоких энергий при  $E > 10^{20}$  эВ. Ненаблюдение такого вклада позволяет поставить ограничения на параметры моделей тяжелой темной материи [53].

*3.3. Массивные фотоны и электрическая асимметрия Вселенной.* Согласно результатам современных наблюдений, масса фотона, если она ненулевая, не может превышать  $10^{-18}$  эВ [54]. В то же время даже ничтожно малая масса фотона может иметь значимые астрофизические проявления. Как показано в работах [55–57] наличие сколь угодно малой массы фотона приводит к полному исчезновению кулоновского поля электрически заряженных черных дыр. В работе [58] вычислена скорость исчезновения кулоновского поля, создаваемого черной дырой при поглощении последней заряженных частиц из межзвездного пространства, в случае отличной от нуля массы фотона. Показано, что эта скорость не зависит от величины массы фотона и, таким образом, нет непрерывного предельного перехода от массивной электродинамики к электродинамике Максвелла. В ранних исследованиях полагалось, что это время обратно пропорционально массе фотона в первой или второй степени. При существующем ограничении сверху на массу фотона время исчезновения поля могло бы превышать возраст Вселенной. Наш результат показывает, что бесследное исчезновение заряда в черной дыре может привести к генерации зарядовой асимметрии Вселенной за космологически короткое время и к потенциально наблюдаемым эффектам.

Как известно, большая подвижность протонов по сравнению с электронами в межзвездном газе в современной Вселенной приводит к ненулевому заряду небесных тел [59–61]. Черные дыры тут не являются исключением и также приобретают электрический заряд. В итоге в каноническом случае возникает рав-

новесная ситуация, когда кулоновское отталкивание протонов компенсирует их большую подвижность и электрический заряд достигает некоторого равновесного значения. Для достаточно легких черных дыр с массами  $M \lesssim 10^{20}$  г кулоновское поле на горизонте становится сравнимым со швингеровским, что приводит к рождению  $e^+e^-$ -пар. Электроны захватываются черной дырой, а позитроны испускаются наружу. Иными словами, черные дыры приобретают некоторый равновесный заряд и “перерабатывают” протоны в позитроны. За счет указанного механизма черная дыра с массой  $10^{20}$  г может приобрести положительный заряд, превышающий заряд электрона в  $5 \times 10^7$  раз. Этот механизм может служить частичным объяснением возникновения наблюдаемой линии 511 кэВ [62, 63].

Ситуация кардинально меняется, если масса фотона не равна нулю. Как отмечено выше, в таком случае электрическое поле черной дыры бесследно исчезает. С учетом того, что черные дыры захватывают больше протонов, чем электронов, возникает электрическая асимметрия Вселенной, т.е. ненулевой средний пространственно распределенный электрический заряд. Следует отметить, что современные ограничения на зарядовую асимметрию Вселенной находятся на уровне  $10^{-26}$  величин заряда электрона на один барион [64]. Если же будет показано, например, с помощью наблюдений рассеяния заряженных частиц (протонов или электронов) на черной дыре, что электрический заряд какой-либо черной дыры отличен от нуля, то можно будет заключить, что масса фотона тождественно равна нулю.

Возникающие в заряженной Вселенной крупномасштабные, хотя и малые, электрические поля могут оказать заметное влияние на спектр и угловое распределение космических лучей, особенно при низких энергиях.

Возможное возникновение ненулевой средней космологической плотности электрического заряда привело бы к ускоренному космологическому расширению, аналогичному тому, которое возникает в  $F(R)$ -теориях, предлагаемых как раз с целью феноменологического описания темной энергии, инициирующей наблюдаемое ускоренное расширение Вселенной. Однако количественного рассмотрения того, какой по величине вклад в ускоренное космологическое расширение дает электрический заряд Вселенной, пока проведено не было.

Обычно предполагается, что Вселенная электрически нейтральна, но это не более, чем гипотеза, в частности, из-за предполагаемого отсутствия какого-либо механизма генерации зарядовой асимметрии

Вселенной. Излагаемый в наших работах подход дает возможность непротиворечивого описания процесса создания электрически заряженной Вселенной. Как хорошо известно, в физике практически нет абсолютных. Все утверждения должны проверяться на согласия с существующими данными эксперимента, а также на отсутствие противоречий модели с установленными фундаментальными свойствами теории. Предлагаемый нами механизм удовлетворяет всем этим требованиям.

*3.4. Черные дыры и барионная асимметрия.* В работе [65] предложен новый механизм генерации барионной асимметрии Вселенной за счет асимметричного захвата барионов и антибарионов первичными черными дырами. Этот механизм эффективно работает в тепловом равновесии и при сохранении барионного числа в физике частиц, представляя, таким образом, пример выхода за рамки канонического сценария бариогенезиса А. Д. Сахарова [66]. Для реализации этого механизма в ранней Вселенной должны существовать как сверхмассивные барионы  $X$  с массами порядка  $10^{13}$  ГэВ, в захватах которых образуется асимметрия, так и другие сверхмассивные барионы  $Y$ , наличие которых в радиационных поправках к сечению рассеяния приводит к нарушению  $C$ - и  $CP$ -асимметрий, необходимого для возникновения различной подвижности  $X$  и  $\bar{X}$  (анти- $X$ ) частиц в гравитационном поле черной дыры в ранней Вселенной. Время жизни этих частиц должно быть достаточно велико, чтобы они были представлены в значительном количестве в первичной плазме до испарения первичных черных дыр. Кроме того, по этой же причине они не должны заметно выгорать по механизму Зельдовича [67, 68] и их плотность должна сильно превосходить равновесную. Это требует малой величины сечения их аннигиляции и большого времени жизни. В работе [65] показано, что предложенный механизм эффективен при больших значениях масс барионов и, соответственно, меньших значениях масс первичных черных дыр. Оценка производимой асимметрии при массах тяжелых барионов порядка  $10^{13}$  ГэВ и массах первичных черных дыр порядка  $10^4$  г находится на уровне наблюдаемой величины барионной асимметрии Вселенной. При достаточно позднем распаде этих тяжелых барионов продукты их распада могут вносить вклад в потоки космических лучей сверхвысоких энергий. Таким образом, предложенный механизм может в принципе быть проверен по вкладу в космические лучи высокоэнергичных частиц от распадов  $X$  или аннигиляции  $X$  и  $\bar{X}$ .

*3.5. Электродинамика черных дыр.* Исследование возможных механизмов электромагнитного из-



лучения при слиянии черных дыр позволило сделать заключение о возникновении электрического заряда черной дыры в первичной плазме за счет механизма Шварцмана [59], основанном на различии подвижностей электронов и протонов в межзвездной среде, что естественным образом приводит к генерации сопутствующего излучения в процессе слияния двух заряженных тел. Была также рассмотрена гипотетическая возможность возникновения ненулевой плотности заряда в окружающем двойную систему черных дыр межзвездном газе. Было показано, что в процессе слияния возникает дипольное электромагнитное излучение, интенсивность которого зависит от величины приобретенного заряда каждой из черных дыр и истории их эволюции. Этот процесс может быть усилен при любом ненулевом значении массы фотона, так как независимо от ее величины возникает электрическая асимметрия Вселенной. В последнем случае мы опираемся на результаты, полученные в нашей работе [58].

*3.6. Спектр масс первичных черных дыр.* В работах [69, 70] были вычислены распределения по чирп-массам двойных систем черных дыр, являющихся источниками гравитационного излучения, обнаруженного на интерферометрах LIGO/Virgo, и было проведено сравнение с распределением, полученным на основе предположения о логнормальном спектре масс первичных черных дыр (1). Результаты демонстрируют замечательное согласие наблюдений с предсказаниями теории, причем наилучшая подгонка получается при  $M_0 \approx 17M_\odot$ ,  $\gamma = 0.9$ . Так как зависимость от массы входит под знаком логарифма, то значение функции распределения довольно мягко зависит от  $M_0$ . Например, при  $\gamma = 1$  и  $M = 50M_\odot$  плотности черных дыр различаются примерно в 4 раза для  $M_0 = 10M_\odot$  и  $M_0 = 17M_\odot$ .

В более поздней работе [71] был представлен новый анализ данных LIGO/Virgo/KAGRA. Согласно результатам авторов распределение по чирп-массам двойных систем черных дыр имеет два ярко выраженных пика, которые можно объяснить двумя различными популяциями двойных систем черных дыр. Пик при низкой массе с  $M_0 \sim 10M_\odot$  связан с астрофизическими двойными системами черных дыр, образовавшимися в локальной Вселенной при эволюции двойных звездных систем. Их формирование может быть объяснено моделью коллапсирующего кора массивных звезд. Второй пик обязан своим происхождением двойным системам первичных черных дыр с логнормальным спектром с параметрами  $M_0 \simeq 33M_\odot$  и  $\gamma \simeq 10$ . Модель включает в себя две примерно равные популяции сливающихся аст-

рофизических и первичных черных дыр. Однако второй пик с полученными параметрами исходного спектра масс приводит к практически дельта-образному распределению вокруг  $M = 33M_\odot$ , так что ни более легкие, ни более тяжелые первичные черные дыры не могут образоваться. Ожидаемое значительное увеличение статистики слияний двойных черных дыр в продолжающейся серии наблюдений O4 LIGO/Virgo/KAGRA должно внести ясность в возможность описания наблюдаемых источников единым логнормальным спектром масс черных дыр.

*3.7. Антиматерия в Млечном пути.* Одним из следствий механизма рождения черных дыр, предложенном в работах [3, 4], является, в частности, предсказание наличия заметного количества антиматерии в нашей Галактике. В связи с этим нами был разработан новый способ идентификации антиматерии по узким линиям рентгеновского излучения и была установлена связь его интенсивности с предполагаемой плотностью первичных черных дыр [72]. Недавние астрономические наблюдения убедительно подтверждают это предсказание, свидетельствуя о наличии заметного количества антиматерии в Млечном Пути (см., например, недавний обзор [73], где приведены ссылки на оригинальные работы). А именно:

1) в данных детектора AMS (Alpha Magnetic Spectrometer, Магнитный альфа-спектрометр), установленного на Международной космической станции, имеются указания на избыточный поток ядер антидейтерия и антигелия по сравнению с ожидаемыми потоками из вторичных процессов в космических лучах;

2) наблюдаемая аннигиляционная линия 511 кэВ говорит об обильной популяции позитронов в центре Галактики;

3) наблюдения избыточного гамма-излучения с энергией около 500 МэВ от 14 звезд наиболее естественно объяснить тем, что эти звезды состоят из антиматерии [74].

Все это находится в соответствии с давними предсказаниями работ [3, 4] о наличии антиматерии в Галактике. Доля антивещества модельно зависима и не может быть предсказана теоретически. Но сам факт наличия заметного количества антиматерии в Галактике служит сильным указанием на справедливость модели. Естественно считать, что эта доля невелика. В частности, количество антизвезд и их спектр масс зависят от взаимного расположения плоских направлений в потенциале барионного скаляра в модели Аффлека–Дайна и, скорее всего, заметно меньше доли черных дыр с близкими массами. Утверждения о логнормальном спектре масс антизвезд, конечно

же, не делается. Разумеется, гипотезу об антиматерии в Галактике нельзя еще считать абсолютно доказанной, но указания на галактическую антиматерию вполне серьезные.

**4. Заключение.** Резюмируя, можем сказать, что многоканальный подход в космологии как к наблюдениям, так и к теоретическим проблемам является чрезвычайно плодотворным и его развитие будет в значительной степени способствовать дальнейшему прогрессу в этой чрезвычайно перспективной области на стыке космологии, квантовой теории поля и физики элементарных частиц.

Перечислим основные результаты, полученные в ходе проведенных исследований:

1) построены реалистичные карты межгалактических магнитных полей, получены ограничения на их величину из данных  $\gamma$ -астрономии и исследованы возможности улучшения таких ограничений;

2) оценка вклада, вносимого сверхтяжелыми частицами темной материи в спектр космических лучей ультравысоких энергий с  $E > 10^{20}$  эВ, для объяснения которых неприменимы обычные астрофизические источники, и вывод о возможности экспериментальной проверки модели на основании данной оценки;

3) предложение гипотетической модели электрически заряженной вселенной;

4) разработка нового механизма генерации барионной асимметрии Вселенной первичными черными дырами;

5) изучение электромагнитных процессов при слиянии черных дыр;

6) проверка формы спектра масс первичных черных дыр по чирп-массам, измеряемым на интерферометрах LIGO/Virgo/KAGRA, а также по наблюдаемому количеству сверхтяжелых черных дыр и черных дыр промежуточной массы, что очень хорошо согласуется с наблюдениями, см. [70];

7) впечатляющее предсказание о наличии значительного количества антиматерии в Млечном Пути подкрепляется наблюдениями позитронов, антиядер и антизвезд;

8) разработка нового метода идентификации антизвезд в Галактике.

**Финансирование.** Работа поддержана грантом # 20-42-09010 Российского научного фонда.

**Конфликт интересов.** Конфликт интересов отсутствует.

- KAGRA Collaboration), *Phys. Rev. X* **13**(1), 011048 (2023).
2. S. Blinnikov, A. Dolgov, N. K. Porayko, and K. Postnov, *JCAP* **11**, 036 (2016).
  3. A. Dolgov and J. Silk, *Phys. Rev. D* **47**, 4244 (1993).
  4. A. D. Dolgov, M. Kawasaki, and N. Kevlishvili, *Nucl. Phys. B* **807**, 229 (2009).
  5. A. Dolgov and K. Postnov, *JCAP* **09**, 018 (2017).
  6. A. Dolgov and K. Postnov, *JCAP* **07**, 063 (2020).
  7. A. A. Starobinsky, *Phys. Lett. B* **91**, 99 (1980).
  8. E. V. Arbuzova, *Int. J. Mod. Phys. D* **30**(16), 2140002 (2021).
  9. E. Arbuzova, *Moscow Univ. Phys. Bull.* **77**(2), 288 (2022).
  10. A. Monna, S. Seitz, N. Greisel et al. (Collaboration), *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **438**(2), 1417 (2014).
  11. W. Zheng, A. Zitrin, L. Infante, N. Laporte, X. Huang, J. Moustakas, H. C. Ford, X. Shu, J. Wang, J. M. Diego, F. E. Bauer, P. Troncoso Iribarren, T. Broadhurst, and A. Molino, *Astrophys. J.* **836**(2), 210 (2017).
  12. P. A. Oesch, G. Brammer, P. G. van Dokkum et al. (Collaboration), *Astrophys. J.* **819**, 129 (2016).
  13. S. L. Finkelstein, M. B. Bagley, H. C. Ferguson et al. (Collaboration), *Astrophys. J. Lett.* **946**, L13 (2023).
  14. Y. Harikane, M. Ouchi, M. Oguri, Y. Ono, K. Nakajima, Y. Isobe, H. Umeda, K. Mawatari, and Y. Zhang, *Astrophys. J. Suppl.* **265**(1), 5 (2023).
  15. M. Castellano, A. Fontana, T. Treu et al. (Collaboration), *Astrophys. J. Lett.* **938**, L15 (2022).
  16. P. Santini, A. Fontana, M. Castellano et al. (Collaboration), *Astrophys. J. Lett.* **942**, L27 (2023).
  17. R. Endsley, D. P. Stark, J. Lyu, F. Wang, J. Yang, X. Fan, R. Smit, R. Bouwens, K. Hainline, and S. Schouws, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **520**, 4609 (2023).
  18. A. D. Dolgov, *Uspekhi Fizicheskikh Nauk* **188**(2), 121 (2018).
  19. C. Alcock, R. A. Allsman, D. R. Alves et al. (The MACHO Collaboration), *Astrophys. J.* **542**, 281 (2000).
  20. D. P. Bennett, *Astrophys. J.* **633**, 906 (2005).
  21. S. I. Blinnikov, A. D. Dolgov, and K. A. Postnov, *Phys. Rev. D* **92**(2), 023516 (2015).
  22. S. Mao, *Res. Astron. Astrophys.* **12**, 947 (2012).
  23. J. L. Han, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.* **55**, 111 (2017).
  24. K. Dolag, D. Grasso, V. Springel, and I. Tkachev, *JCAP* **01**, 009 (2005).
  25. F. Marinacci, M. Vogelsberger, R. Pakmor, P. Torrey, V. Springel, L. Hernquist, D. Nelson, R. Weinberger, A. Pillepich, J. Naiman, and S. Genel, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **480**(4), 5113 (2018).
  26. J. Jasche and B. D. Wandelt, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **432**, 894 (2013).
  27. J. Jasche and G. Lavaux, *Astron. Astrophys.* **625**, A64 (2019).

1. R. Abbott, T. D. Abbott, F. Acernese et al. (LIGO Scientific Collaboration, Virgo Collaboration, and

28. M. Joyce and M. E. Shaposhnikov, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 1193 (1997).
29. R. Banerjee and K. Jedamzik, *Phys. Rev. D* **70**, 123003 (2004).
30. M. Giovannini and M. E. Shaposhnikov, *Phys. Rev. D* **62**, 103512 (2000).
31. R. Teyssier, *Astron. Astrophys.* **385**, 337 (2002).
32. S. Fromang, P. Hennebelle, and R. Teyssier, *RAMSES-MHD: an AMR Godunov code for astrophysical applications*, in *SF2A-2005: Semaine de l'Astrophysique Francaise*, ed. by F. Casoli, T. Contini, J. M. Hameury, and L. Pagani, Les Ulis, EDP Sciences, Dec. (2005), p. 743.
33. A. Korochkin, A. Neronov, G. Lavaux, M. Ramsoy, and D. Semikoz, *JETP* **134**(4), 498 (2022).
34. K. Bondarenko, A. Boyarsky, A. Korochkin, A. Neronov, D. Semikoz, and A. Sokolenko, *Astron. Astrophys.* **660**, A80 (2022).
35. O. Kalashev, A. Korochkin, A. Neronov, and D. Semikoz, *Astron. Astrophys.* **675**, A132 (2023).
36. V. Berezhinsky and O. Kalashev, *Phys. Rev. D* **94**(2), 023007 (2016).
37. R. Alves Batista, J. Becker Tjus, J. Dörner et al. (Collaboration), *JCAP* **09**, 035 (2022).
38. M. Blytt, M. Kachelrieß, and S. Ostapchenko, *Comput. Phys. Commun.* **252**, 107163 (2020).
39. K. Jedamzik and L. Pogosian, *Phys. Rev. Lett.* **125**(18), 181302 (2020).
40. H. A. G. Cruz, T. Adi, J. Flitter, M. Kamionkowski, and E. D. Kovetz, *Phys. Rev. D* **109**(2), 023518 (2024).
41. A. Neronov and I. Vovk, *Science* **328**, 73 (2010).
42. M. Ackermann, M. Ajello, L. Baldini et al. (The Fermi-LAT Collaboration, and J. Biteau), *Astrophys. J. Suppl.* **237**(2), 32 (2018).
43. V. A. Acciari, I. Agudo, T. Aniello et al. (the MAGIC Collaboration and A. Neronov, D. Semikoz, and A. Korochkin), *Astron. Astrophys.* **670**, A145 (2023).
44. K. Dolgikh, A. Korochkin, G. Rubtsov, D. Semikoz, and I. Tkachev, *JETP* **136**(6), 704 (2023).
45. K. Dolgikh, A. Korochkin, G. Rubtsov, D. Semikoz, and I. Tkachev, arXiv:2312.06391 [astro-ph.HE].
46. E. V. Arbutova, A. D. Dolgov, and L. A. Panasenko, *JETP* **135**(3), 304 (2022).
47. H. T. Cho and A. D. Speliotopoulos, *Phys. Rev. D* **52**, 5445 (1995).
48. H. Iguchi, K.-i. Nakao, and T. Harada, *Phys. Rev. D* **57**, 7262 (1998).
49. F. Di Gioia and G. Montani, *Eur. Phys. J. C* **79**(11), 921 (2019).
50. B. Wilson and C. C. Dyer, *Gen. Relativ. Gravit.* **41**, 1725 (2009).
51. A. D. Dolgov, L. A. Panasenko, and V. A. Bochko, *Universe* **10**, 7 (2023).
52. E. V. Arbutova, A. D. Dolgov, and R. S. Singh, *Eur. Phys. J. C* **80** (11), 1047 (2020).
53. O. E. Kalashev, M. Y. Kuznetsov, and Y. V. Zhezher, *JCAP* **10**, 039 (2019).
54. R. L. Workman, V. D. Burkert, V. Crede et al. (Particle Data Group), *PTEP* **2022**, 083C01 (2022).
55. A. Vilenkin, *Phys. Rev. D* **20**, 373 (1979).
56. B. Leaute and B. Linet, *Gen. Rel. Grav.* **17**, 783 (1985).
57. A. D. Dolgov, H. Maeda, and T. Torii, arXiv:hep-ph/0210267.
58. A. D. Dolgov and K. S. Gudkova, *Phys. Lett. B* **810**, 135844 (2020).
59. V. F. Shvartsman, *Astrophysics* **6**, 159 (1970).
60. R. Turolla, S. Zane, A. Treves, and A. Illarionov, *Astrophys. J.* **482**, 377 (1997).
61. S. Zane, R. Turolla, and A. Treves, *Astrophys. J.* **501**, 258 (1998).
62. C. Bambi, A. D. Dolgov, and A. A. Petrov, *JCAP* **09**, 013 (2009).
63. A. D. Dolgov and A. S. Rudenko, arXiv:2308.01689 [hep-ph].
64. C. Caprini, S. Biller, and P. G. Ferreira, *JCAP* **02**, 006 (2005).
65. A. D. Dolgov and N. A. Pozdnyakov, *Phys. Rev. D* **104**(8), 083524 (2021).
66. A. D. Sakharov, *Pis'ma v ZhETF* **5**, 32 (1967).
67. Y. B. Zeldovich, *Advances in Astronomy and Astrophysics* **3**, 241 (1965).
68. Y. B. Zel'dovich, L. B. Okun', and S. B. Pikel'ner, *Soviet Phys.-Uspekhi* **8**, 702 (1966).
69. A. D. Dolgov, A. G. Kuranov, N. A. Mitichkin, S. Porey, K. A. Postnov, O. S. Sazhina, and I. V. Simkin, *JCAP* **12**, 017 (2020).
70. K. Postnov, A. Dolgov, N. Mitichkin, and I. Simkin, arXiv:2101.02475 [astro-ph.HE].
71. K. A. Postnov and N. A. Mitichkin, *Phys. Part. Nucl.* **54**(5), 884 (2023).
72. A. E. Bondar, S. I. Blinnikov, A. M. Bykov, A. D. Dolgov, and K. A. Postnov, *JCAP* **03**, 009 (2022).
73. A. D. Dolgov, arXiv:2310.00671 [astro-ph.CO].
74. S. Dupourqué, L. Tibaldo, and P. Von Ballmoos, *Phys. Rev. D* **103**(8), 083016 (2021).

# “Аномальный” фотоэффект в методе сверхбыстрой электронной дифракции

С. А. Асеев<sup>+</sup>, Б. Н. Миронов<sup>+</sup>, Д. Г. Пойдашев<sup>+1)</sup>, А. А. Ищенко\*, Е. А. Рябов<sup>+</sup>

<sup>+</sup> Институт спектроскопии РАН, 108840 Троицк, Москва, Россия

\* РТУ-МИРЭА – Российский технологический университет,

Институт тонких химических технологий имени М. В. Ломоносова, 119571 Москва, Россия

Поступила в редакцию 6 марта 2024 г.

После переработки 6 марта 2024 г.

Принята к публикации 7 марта 2024 г.

Зондирование электронными импульсами быстропротекающих лазерно-индуцированных процессов открыло возможность прямого наблюдения структурной динамики в веществе с высоким пространственно-временным разрешением. В качестве фотокатода оказалось удобным использовать тонкую золотую пленку, а сам процесс фотоэлектронной эмиссии - индуцировать фемтосекундным УФ излучением с энергией кванта около 4.65 ÷ 4.75 эВ (в частности, для III гармоника Ti:Sa лазера  $\hbar\omega \cong 4.65$  эВ). Для линейного фотоэффекта это противоречит справочным данным о работе выхода чистого металла ( $W_{Au} \cong 5.1 \div 5.3$  эВ). Проведен анализ причин такого несоответствия и предложена модель генерации фотоэлектронных импульсов, с помощью которой достигнуто хорошее совпадение с экспериментальными данными.

DOI: 10.31857/S1234567824070036, EDN: VZDSTE

**1. Введение.** Метод сверхбыстрой электронной дифракции (UED) получил большое развитие в современной мировой практике, охватывающей такие дисциплины, как физика, химия, биофизика, нанотехнологии [1–4]. Основанный на использовании фемтосекундной лазерной техники, UED позволяет детектировать лазерно-индуцированную структурную динамику в веществе с высоким пространственно-временным разрешением. Это открывает возможность прямого наблюдения когерентной динамики ядер (фс – фемтосекундное временное разрешение) и электронов (ас – аттосекундное временное разрешение) фотоиндуцированных процессов в свободных молекулах и конденсированном веществе. В отличие от крупномасштабного рентгеновского лазера на свободных электронах (XFEL) метод UED обеспечивает возможность проведения исследований с помощью лабораторной установки.

Схематически UED представлен двумя каналами: возбуждения (лазерной накачки) образца и его зондирования задержанными во времени электронными импульсами. Оптическая линия задержки позволяет осуществить развертку исследуемой динамики в виде последовательности электронограмм, регистрируемых на позиционно-чувствительном детекторе в

регулируемой временной последовательности. Прецизионная синхронизация обоих каналов достигается за счет единого задающего источника ультракоротких лазерных импульсов. Для генерации электронных сгустков удобно использовать фотоэффект в металле или полупроводнике [5, 6].

Использование полупрозрачной золотой пленки в качестве фотокатода обеспечило возможность создания импульсного электронного пучка достаточно простым и эффективным способом на-просвет. Для активации такого катода можно применить импульсное лазерное излучение в ультрафиолетовом (УФ) спектральном диапазоне (линейный фотоэффект), либо в видимом диапазоне с длиной волны  $\lambda \cong 560$  нм (2-фотонная электронная эмиссия).

В качестве источника УФ импульсов оказалось удобным использовать III гармонику ( $\lambda \cong 265$  нм) фемтосекундного Ti:Sa лазера, который получил большое распространение во многих лабораториях, занимающихся изучением быстропротекающих процессов. Однако здесь прослеживается явное противоречие: энергия кванта такого УФ излучения оказывается заметно меньше, чем работа выхода чистого золота  $W_{Au}$ , приведенная во многих справочных пособиях. Несмотря на то, что все эксперименты в области UED выполнены в условиях высокого вакуума (зачастую в сверхвысоком вакууме), с тонкими пленками, полученными разными методами и в раз-

<sup>1)</sup>e-mail: poydashev@isan.troitsk.ru

ных лабораториях, расхождение между справочными данными и “фактической”  $W_{Au}$  является заметным и может достигать величины около 1 эВ.

Цель данной статьи – установить причины такого несоответствия. Здесь проанализированы возможные причины уменьшения работы выхода для тонкопленочного золотого катода, а также отмечены факторы, влияющие на проведение эксперимента в области UED. Предложена модель формирования ультракоротких электронных импульсов, объясняющая экспериментально полученные результаты.

**2. Экспериментальные схемы UED с тонкопленочным золотым катодом.** Высокое временное разрешение метода UED обусловлено использованием ультракоротких синхронизованных оптических и электронных импульсов. Если в канале возбуждения можно использовать коммерчески доступные источники фемтосекундных лазерных импульсов с длительностью, достигающей  $\approx 5$  фс, то для канала зондирования возникают известные затруднения (см., например, [1, 3, 4]).

Прежде всего, это кулоновское расталкивание электронов, приводящее к существенному ухудшению временного разрешения UED. Чтобы уменьшить влияние этого эффекта, в эксперименте необходимо использовать зондирующие сгустки (с начальным поперечным размером  $10 \div 30$  мкм, определяемым диаметром лазерного пучка в фокальном пятне), содержащие сравнительно небольшое число, до  $\sim 10^4$  электронов в каждом импульсе, увеличить их кинетическую энергию, а также уменьшить расстояние между катодом и образцом. В условиях большого времени накопления, когда для надежной регистрации картины электронной дифракции необходимо суммировать вклады от многих импульсов, – наблюдение структурной динамики в течение нескольких часов требует стабильной и долговременной работы фотоэлектронного источника.

Важнейшее отличие фемтосекундного электронографа от такой крупномасштабной установки, как XFEL, является его сравнительная простота и компактность. Для генерации импульсного электронного пучка в методе UED оказалось весьма эффективным использовать тонкопленочные (толщиной несколько десятков нм) полупрозрачные металлические катоды, чтобы на-просвет подводить лазерное излучение непосредственно к области фотоэлектронной эмиссии в вакууме. III гармоника фемтосекундного Ti:Sa лазера ( $\lambda \cong 265$  нм,  $\hbar\omega \cong 4.65$  эВ) позволила реализовать линейный фотоэффект в пленках золота и серебра. При этом серебро хотя и обеспечивало более высокую квантовую эффективность,

но по возможности долговременной работы такого катода на практике значительно уступало золоту.

Поэтому тонкопленочный золотой фотокатод был и остается основой элегантной схемы формирования фотоэлектронных импульсов ультракороткой длительности в компактной установке UED (рис. 1) [7–14].

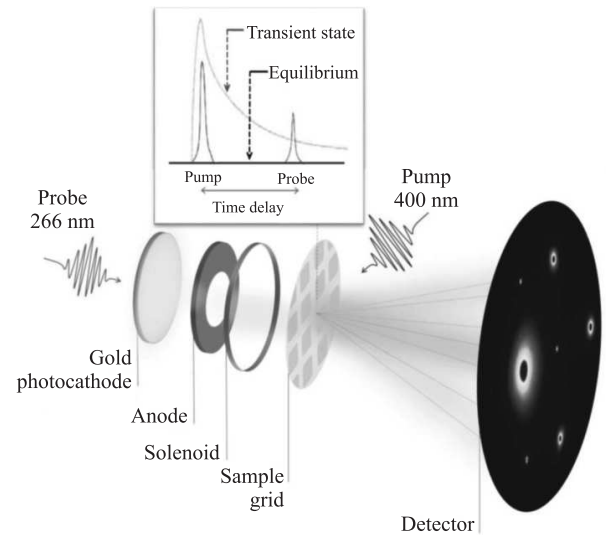


Рис. 1. Схема экспериментальной установки UED. Электронный сгусток, генерируемый фотокатодом (III гармоника фемтосекундного Ti:Sa лазера), ускоряется в электрическом поле и фокусируется магнитной линзой на основе соленоида. Возбуждение образца осуществляется II гармоникой того же Ti:Sa лазера. Дифракционная картина регистрируется с помощью позиционно-чувствительного детектора

В работе [7] методом сверхбыстрой электронной дифракции исследован фотоиндуцированный отклик в высококачественном монокристалле кремния. Продемонстрировано, что в противоречии с известным эффектом Дебая–Уоллера фотостимулированный нагрев кристаллической решетки способен привести к неожиданному росту интенсивности брэгговских пиков на дифракционной картине. Показано, что такое поведение можно объяснить исключительно в рамках динамической теории дифракции, с учетом многократного рассеяния зондирующих электронов в образце. Сделан вывод, что учет таких эффектов открывает путь к количественному исследованию неравновесной динамики дефектов в высококачественных совершенных монокристаллах.

Заметим, что именно золотой тонкопленочный катод использован на установке, описанной в работах [11, 12], в которых IV гармоника фемтосекундного Yb:KGW лазера ( $\lambda \cong 260$  нм,  $\hbar \cong 4.78$  эВ) индуциру-

ет фэтоэлектронную эмиссию в условиях сверхвысокого вакуума. В [12] исследован гигагерцовый структурный резонанс в антиферромагнитной 16 нм пленке ( $\text{FePS}_3$ ) при охлаждении материала ниже температуры Нееля. Методом UED зарегистрирован сдвиг слоев в образце, когда отдельные участки тонкой пленки антиферромагнетика, подобно когерентным осцилляторам, смещаются параллельно друг другу.

Если в [7–12, 14] тонкая золотая пленка используется в режиме линейного фотоэффекта, то 2-фотонная электронная эмиссия при облучении подобного катода лазерными импульсами в видимом диапазоне открывает новые возможности. В качестве примера следует отметить компактный фемтосекундный электронограф [13], в котором использовано фемтосекундное лазерное излучение ( $\lambda \cong \cong 565$  нм,  $\hbar \cong \cong 2.2$  эВ) на выходе из параметрического усилителя. Подстраивая длину волны “под порог” 2-фотонной эмиссии, достигнута высокая когерентность зонда за счет “нулевой” начальной кинетической энергии электронов. Это позволило зарегистрировать отклонения [13, 15] от широко известной двухтемпературной модели, описывающей динамику возбуждения электронной и фононной подсистем в твердом теле [16, 17]. На основе 2-фотонной электронной эмиссии [18, 19] разработан стабильный источник однопериодных импульсов (для которого эффективная  $W_{\text{Au}}$  оказалась около 4.3 эВ), когда практически устранено кулоновское расталкивание.

**3. Факторы, влияющие на работу выхода золотого катода.** Для того, чтобы выяснить причины заметного расхождения (порог фотоэлектронной эмиссии для тонкой пленки золота оказался заметно ниже по сравнению с имеющимися литературными данными;  $4.3 \div 4.4$  эВ [13, 18, 19] вместо  $5.1 \div 5.3$  эВ [20–22]), рассмотрим несколько факторов. Во-первых, из описания эффекта Шоттки [21] известно, что внешнее электрическое поле  $F$  уменьшает работу выхода  $W$ . Если поверхность планарного катода однородна, то это уменьшение  $\Delta W$  [эВ] при наложении электрического поля напряженностью  $F$  [В/см], приблизительно равно:

$$\Delta W \cong 3.8 \times 10^{-4} \sqrt{F}. \quad (1)$$

В ускоряющем промежутке электронографа следует поддерживать высокую напряженность поля  $E$ , так как ускорение электронов на малом отрезке позволяет не только минимизировать время пролета до образца, но и уменьшить влияние разброса начальных энергий электронов для достижения высокого временного разрешения. Однако для предотвращения пробоев и обеспечения условий стабильной рабо-

ты прибора максимальная  $F$  ограничена величиной на уровне  $10^5$  В/см. Тогда, согласно (1)  $\Delta W \cong 0.1$  эВ, что не способно объяснить вышеуказанное расхождение. Поэтому следует проанализировать другие причины такого несоответствия.

Как отмечено в [23], существенное уменьшение  $W_{\text{Au}}$  от  $\approx 5.1$  эВ до  $\approx 4.4$  эВ может происходить за счет хемосорбции прочно связанного монослоя полярных молекул (таких, как вода), а также углеводородов. В [24] исследована динамика поверхностного загрязнения  $\text{Au}(111)$ , выращенного на слюдяных подложках, в разные моменты времени (минуты, часы, дни) с помощью сканирующей атомно-силовой микроскопии и кельвин-зондовой силовой микроскопии, что обеспечило понимание механизмов поверхностной реорганизации, вызывающих изменение  $W_{\text{Au}}$  в диапазоне между 5.25 и 4.75 эВ исключительно за счет разных условий хранения золотого образца. Например, на открытом воздухе или в герметично закрытом контейнере в той же лаборатории. Как оказалось, так называемый адвентивный углерод (AdC) присутствует повсеместно на поверхности практически всех неорганических материалов за счет воздушно-капельного механизма. В [24] выявлены два режима загрязнения. Начальная быстрая фаза отвечает адсорбции органических молекул на поверхности золота в течение нескольких минут после изменений условий воздействия окружающей среды. В более медленной фазе накопление AdC сопровождается миграцией углеродсодержащих кластеров по поверхности и их ростом.

С одной стороны, наличие органической пленки на поверхности золотого катода способно объяснить возможность электронной эмиссии под действием лазерных импульсов в УФ диапазоне (когда  $\hbar\omega \cong 4.65 \div 4.75$  эВ) в режиме линейного фотоэффекта. Однако, с другой стороны, стабильная долговременная работа источника электронов в условиях высокого вакуума требует чистых условий проведения эксперимента, при которых AdC пленка может легко разрушаться под действием УФ лазерных импульсов. В связи с этим, важно понять, насколько исчерпывающим является такое описание и в какой мере механизм уменьшения работы выхода золота за счет наличия углеродсодержащих молекул (или полярных молекул воды) на его поверхности является единственно возможным.

**4. Механизм фотоэлектронной эмиссии в биметаллической структуре  $\text{Cr}/\text{Au}$  под действием фемтосекундных лазерных импульсов.** Учтем, что основой компактного фотоэлектронного источника для многих схем UED стала биметалличе-

ская наноструктура. В [7–13] эмитирующий слой золота наносился поверх специального буферного слоя для повышения адгезии Au к прозрачной подложке, через которую УФ излучение подводилось к катоду в вакууме (рис. 2). Так, для эксперименталь-

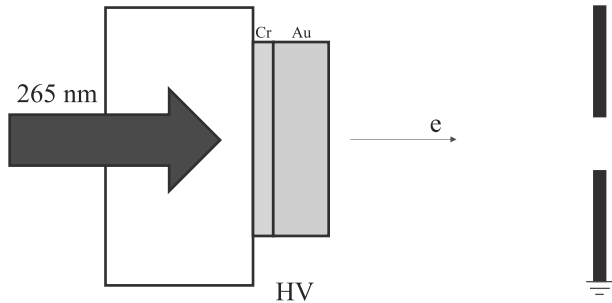


Рис. 2. (Цветной онлайн) Тонкопленочная структура Cr/Au под действием УФ лазерного излучения “на-просвет” эмитирует электроны, которые затем ускоряются за счет действия статического электрического поля в промежутке между катодом и анодом; здесь к катоду приложен высокий отрицательный потенциал HV

ной установки в [11] тонкопленочный золотой фотокатод на сапфировой подложке приготавливался путем электронно-лучевого испарения, когда сначала наносился адгезионный слой хрома толщиной 1 нм, а затем 20-нм слой золота.

Обратим внимание на следующее немаловажное обстоятельство. Согласно прецизионным измерениям квантовой эффективности фотоэлектронной эмиссии [13, 18, 19] работа выхода тонкопленочного катода составляла величину около  $4.3 \div 4.4$  эВ, что фактически совпадало с  $W_{Cr}$ . Действительно, хром обладает сравнительно низкой работой выхода,  $\approx 4.4$  эВ, что совместно с разработанной методикой однородного роста тонких пленок обеспечивает его многочисленные применения [25].

Свойства биметаллических структур типа Cr/Au представляют особый интерес. В [26] с помощью электронной микроскопии, атомно-силовой микроскопии и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии детально исследовано, как адгезионный слой Cr влияет на структуру тонких пленок Au (толщина  $2 \div 20$  нм). Как установлено, для всех образцов кристаллическая ориентация золота была преимущественно [111], а слой хрома оказался частично окисленным [26].

Учитывая, что оксидная пленка способна препятствовать электрическому контакту между Cr и Au, возьмем за основу электронные энергетические диаграммы для двух изолированных друг от друга металлических слоев Au и Cr. В данной моде-

ли “сэндвича” (Cr – оксидный слой – Au) электроны проводимости туннелируют (рис. 3а) из пленки

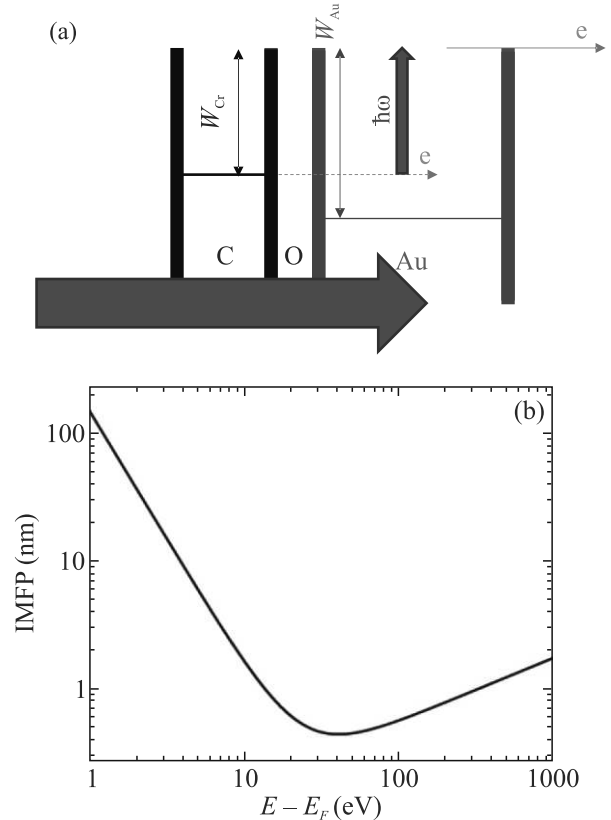


Рис. 3. (Цветной онлайн) Иллюстрация модели “сэндвича” (Cr – оксидный слой – Au) для наблюдения фотоэлектронной эмиссии (а). Здесь учтено, что в процессе изготовления тонкопленочного золотого катода слой хрома покрывается оксидной пленкой (обозначенной O), которая способна препятствовать электрическому контакту между Cr и Au. (б) Универсальная кривая, качественно отражающая зависимость неупругой длины свободного пробега электронов в твердом теле от кинетической энергии электронов [27]. Для золота данные для длин пробега электронов до неупругого рассеяния IMFP, рассчитанные в работе [28], приведены в табл. 1

хрома в объем золота сквозь оксидный слой ( $CrO_x$ ,  $1 < x < 1.5$ ) проводимость которого может “кратковременно включаться” под действием УФ лазерных импульсов (или мощных импульсов в видимом диапазоне). Электроны с энергией  $W_{Au} - W_{Cr} \approx 1$  эВ способны “баллистически” распространяться в золотой пленке на длину в несколько десятков нм (рис. 3б), составляющей фактическую толщину катода. Для них порог фотоэлектронной эмиссии составляет величину  $\approx 4.4$  эВ, что хорошо согласуется с экспериментом [13, 18, 19].

**Таблица 1.** Данные для длин пробега электронов IMFP до неупругого рассеяния в золоте согласно [28]

$E - E_F$ [эВ]	1	2	3	4
IMFP [нм]	30–40	10–20	5–7	3–4

В этой модели роль золотой пленки, как инертного слоя, фактически сводится к поддержанию неизменной структуры самого “сэндвича”. Для использования сравнительно толстого слоя такой защитной пленки (толщина Au 20 ÷ 30 нм) важно, чтобы отличие работы выхода буферного слоя и  $W_{Au}$  было не очень большим, так как длина пробега электронов до неупругого рассеяния в золоте резко падает с ростом кинетической энергии (см. левую часть рис. 3b и табл. 1). На рисунке 3b длина пробега электрона до неупругого рассеяния описывается зависимостью [27]:

$$\text{IMFP} = 143/(E - E_F)^2 + 0.054\sqrt{(E - E_F)}, \quad (2)$$

где  $E_F$  – энергия уровня Ферми; длина пробега электрона IMFP выражена в [нм], а разностная энергия  $E - E_F$  в [эВ]. Учитывая, что выражение (2) применимо исключительно для качественного описания, конкретно для золота данные IMFP, рассчитанные согласно [28], приведены в табл. 1.

Ранее, в [29] зарегистрирован необычный характер многофотонного процесса генерации электронов в биметаллической структуре, когда золотые пленки разной толщины на алюминиевой подложке облучались фемтосекундными лазерными импульсами ( $\lambda \cong 780$  нм,  $\hbar\omega \cong 1.6$  эВ). Установлено, что при  $P$ -поляризации и толщине слоя  $\approx 43$  нм, 4-фотонная эмиссия (характерная для  $W_{Au} \cong 5.3$  эВ) сменялась 3-фотонным процессом; это позволило сделать вывод о наблюдении аномального фотоэффекта в золоте на фемтосекундном масштабе. Учитывая, что суммарная энергия 3 квантов приблизительно равна 4.8 эВ, данный результат [29] свидетельствовал в пользу существенного понижения порога эмиссии электронов из металла. Как оказалось из численного моделирования [30], для биметаллической структуры Al/Au максимум градиента поля возбужденных поверхностных плазмонов приходился на границу раздела, что обеспечивало существенное ускорение электронов за счет действия пондеромоторной силы, индуцированной фемтосекундным излучением. Таким образом, металлическая подложка способна оказывать существенное влияние на фотоэффект в золотой пленке.

Согласно предложенной нами модели, для биметаллического фотокатода (с внешним золотым

защитным слоем) порог фотоэлектронной эмиссии определяется работой выхода металлического буфера  $W$ . Это открывает потенциальную возможность управления начальным распределением вылетевших электронов по энергии за счет подбора буфера, что может быть использовано для повышения когерентности зондирующего пучка в методе UED (когда  $W$  фактически совпадает с энергией кванта одной из гармоник фемтосекундного лазера). Например, применение иттрия с  $W_Y \cong 3$  эВ для изготовления биметаллической структуры Au/Y, возможно, позволит использовать II гармонику Ti:Sa лазера ( $\lambda = 400$  нм,  $\hbar \cong 3.1$  эВ), чтобы не только формировать электронные импульсы с практически “нулевой” начальной энергией, но и, соответственно, упростить схему детектирования структурной динамики на компактной установке.

**5. Заключение.** Следует отметить, что в обзоре [1], посвященном развитию метода UED, в качестве материалов фотокатодов перечислены исключительно медь и серебро, обладающие (согласно табличным данным) сравнительно низкой работой выхода; для поликристаллов  $W_{Cu} \cong 4.4$  эВ и  $W_{Ag} \cong 4.3$  эВ. Вместе с тем, компактные источники электронов на базе тонкопленочного золотого катода позволили выполнить целый ряд успешных экспериментов в этой области [7–14], используя, по сути, “подпороговый” процесс сверхбыстрой фотоэлектронной эмиссии.

“Проблема золотого фотокатода” оказывается наиболее выраженной в случае линейного фотоэффекта, когда можно исключить сверхбыстрый нагрев ансамбля свободных электронов и, соответственно, существенное (на  $\approx 1$  эВ) понижение  $W_{Au}$  за счет хвоста электронного распределения Ферми. Действительно, в отличие от двухфотонного процесса, для линейного фотоэффекта использованы лазерные импульсы сравнительно невысокой интенсивности, что обеспечивало долговременную и стабильную работу фотоэлектронного источника.

Возможно, именно углеродсодержащая пленка на поверхности Au обеспечивает аномально низкую работу выхода для фотоэлектронной эмиссии.

В предложенной нами модели (в которой учтено, что в процессе изготовления биметаллического катода Au/Cr слой хрома покрывается оксидной пленкой, препятствующей электрическому контакту между Cr и Au) “работает” исключительно тонкий слой хрома, а роль золотой пленки, как инертного слоя, фактически сводится к поддержанию неизменной структуры самого “сэндвича” (Cr – оксидный слой – Au). Здесь электроны с уровня Ферми в хrome туннелируют в объем золота (при этом представляется важ-



ным учитывать возможность “быстрого включения” проводимости оксидного слоя под действием фемтосекундных лазерных импульсов). Электроны “баллистически” распространяются на всю толщину золотой пленки, где далее им сообщается энергия, необходимая для фотоэлектронной эмиссии. Основываясь на табличных значениях работ выхода для  $\text{Cu}$  и  $\text{Au}$ , получено хорошее совпадение с экспериментом.

Авторы признательны А. А. Соколику и Ю. Е. Лозовику за внимательное ознакомление с текстом и высказанные ценные замечания.

**Финансирование работы.** Данная статья подготовлена в рамках выполнения работ по Госзаданию FFUU-2022-0004.

**Конфликт интересов.** Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

1. D. Filippetto, P. Musumeci, R. K. Li, B. J. Siwick, M. R. Otto, M. Centurion, and J. P. F. Nunes, *Rev. Mod. Phys.* **94**, 045004 (2022).
2. A. De La Torre, D. M. Kennes, M. Claassen, S. Gerber, J. W. McIver, and M. A. Sentef, *Rev. Mod. Phys.* **93**, 041002 (2021).
3. А. А. Ищенко, Г. В. Фетисов, С. А. Асеев, *Методы детектирования ультрабыстрой динамики вещества*, ФИЗМАТЛИТ, М. (2022).
4. С. А. Асеев, А. С. Ахманов, Г. В. Гиричев, А. А. Ищенко, И. В. Кочкиков, В. Я. Панченко, Е. А. Рябов, *УФН* **190**, 113 (2020).
5. Ch. Li, M. Guan, H. Hong, K. Chen, X. Wang, H. Ma, A. Wang, Zh. Li, H. Hu, J. Xiao, J. Dai, X. Wan, K. Liu, Sh. Meng, and Q. Dai, *Sci. Adv.* **9**, eadf4170 (2023).
6. C. Hong, W. Zou, P. Ran, K. Tanaka, M. Matzelle, W. C. Chiu, R. S. Markiewicz, B. Barbiellini, Ch. Zheng, S. Li, A. Bansil, and R. H. He, *Nature* **617**, 493 (2023).
7. I. G. Vallejo, G. Gallé, B. Arnaud, S. A. Scott, M. G. Lagally, D. Boschetto, P. E. Coulon, G. Rizza, F. Houdellier, D. Bolloc'h, and J. Faure, *Phys. Rev. B* **97**, 054302 (2018).
8. Y. Morimoto, R. Kanya, and K. Yamanouchi, *J. Chem. Phys.* **140**, 064201 (2014).
9. M. S. Robinson, P. D. Lane, and D. A. Wann, *Rev. Sci. Instrum.* **86**, 013109 (2015).
10. C. J. Hensley, J. Yang, and M. Centurion, *Phys. Rev. Lett.* **109**(13), 133202 (2012).
11. A. Zong, *Emergent States in Photoinduced Charge-Density-Wave Transitions*, Doctoral Thesis accepted by Massachusetts Institute of Technology, MA, USA, Springer Theses Recognizing Outstanding Ph.D. Research (2021).
12. A. Zong, Q. Zhang, F. Zhou et al. (Collaboration), *Nature* **620**, 988 (2023).
13. L. Waldecker, R. Bertoni, and R. Ernstorfer, *J. Appl. Phys.* **117**, 044903 (2015).
14. S. A. Aseyev, E. A. Ryabov, B. N. Mironov, I. V. Kochikov, and A. A. Ischenko, *Chem. Phys. Lett.* **797**, 139599 (2022).
15. L. Waldecker, R. Bertoni, R. Ernstorfer, and J. Vorberger, *Phys. Rev. X* **6**(2), 021003 (2016).
16. S. I. Anisimov, A. M. Bonch-Bruевич, M. A. El'yashevich, Ya. A. Imas, N. A. Pavlenko, and G. S. Romanov, *Soviet Physics – Technical Physics* **11**, 945 (1967).
17. S. I. Anisimov, B. L. Kapeliovich, and T. L. Perel'man, *Soviet Physics – JETP* **66**, 776 (1974).
18. M. Aidelsburger, F. O. Kirchner, F. Krausz, and P. Baum, *PNAS* **107**, 19714 (2010).
19. L. Kasmí, D. Kreier, M. Bradler, E. Riedle, and P. Baum, *New J. Phys.* **17**, 033008 (2015).
20. W. M. H. Sachtler, G. J. H. Dorgelo, and A. A. Holscher, *Surf. Sci.* **5**, 221 (1966).
21. *Физические величины. Справочник*, под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова, Энергоатомиздат, М. (1991), 1232 с.
22. *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 95th edition, ed. by W. M. Haynes, D. R. Lide, and T. J. Bruno, CRC Press Taylor & Francis Group, Boca Raton (2014).
23. P. J. Wass, D. Hollington, T. J. Sumner, F. Yang, and M. Pfeil, *Rev. Sci. Instrum.* **90**, 064501 (2019).
24. N. Turetta, F. Sedona, A. Liscio, M. Sambì, and P. Samori, *Adv. Mater. Interfaces* **8**(10), 2100068 (2021).
25. A. Moradi, M. Rog, G. Stam, R. M. Tromp, and S. J. van der Molen, *Ultramicroscopy* **253**, 113809 (2023).
26. M. Todeschini, A. Bastos da Silva Fanta, F. Jensen, J. B. Wagner, and A. Han, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **9**, 37374 (2017).
27. M. P. Seah, W. A. Dench, *Surf. Interface Anal.* **1**, 2 (1979).
28. H. T. Nguyen-Truong, *J. Phys. Chem.* **119**, 7883 (2015).
29. J. Kupersztych and M. Raynaud, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 147401 (2005).
30. M. Raynaud and J. Kupersztych, *Phys. Rev. B* **76**, 241402 (R) (2007).

## Подавление нуклеации в турбулентном потоке газа

С. А. Новопашин<sup>+\*1)</sup>, В. В. Каляда<sup>+</sup>

<sup>+</sup>Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия

<sup>\*</sup>Институт теплофизики Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 11 января 2024 г.

После переработки 16 февраля 2024 г.

Принята к публикации 28 февраля 2024 г.

В работе представлены результаты экспериментального исследования начальной стадии конденсации аргона при истечении в вакуум. Проведены масс-спектрометрические измерения спектра кластеров при истечении из длинной трубы при ламинарном и турбулентном режиме течения в трубе. Экспериментально обнаружено, что турбулентный режим течения в трубе подавляет процесс зародышеобразования конденсированной фазы.

DOI: 10.31857/S1234567824070048, EDN: WOVZOP

При сверхзвуковом расширении газа в вакуум происходит его охлаждение, и достигаются условия пересыщения, что может приводить к протеканию процессов нуклеации с последующим переходом к развитой конденсации [1]. Изучение и поиск практических приложений этого явления продолжается до настоящего времени [2]. Обычно физические процессы в сверхзвуковых струях исследуются при стационарном истечении газов из относительно коротких сопел. При этом роль пограничных слоев сказывается только на периферии струи. В настоящей работе в качестве сопла использована длинная круглая труба (течение Хагена-Пуазейля). В этом случае пограничные слои смыкаются, формируя параболический профиль в ламинарном режиме. Идея настоящих экспериментов состоит в выяснении влияния турбулентного течения в трубе на процесс нуклеации. Возможность такого влияния связана с тем, что собственно и процесс нуклеации носит флуктуационный характер [3].

Течение Хагена-Пуазейля устойчиво по отношению к бесконечно малым возмущениям [4]. Переход к турбулентному режиму происходит в результате внешних возмущений конечной величины, либо недостаточно гладкого входа трубы. Для этого течения существует определенное значение числа Рейнольдса ( $Re = 2040$ ) [5], которое разделяет области качественно различного характера развития возмущений. При этом, если внешние возмущения слабы, то каждая труба характеризуется определенным экспериментальным критическим числом Рейнольд-

са [5]. Это значение определяется величиной шероховатости на входе в трубу и может превышать  $10^5$  [4].

В настоящей работе в качестве сопла использован капилляр – стеклянная труба диаметром  $d = 0.8$  мм и длиной 160 мм. Торцы трубы были обработаны так, что шероховатость существенно различалась. Эксперименты показали, что при течении газа в одном направлении, с более грубым входом, критическое число Рейнольдса ламинарно-турбулентного перехода составило около  $Re^* = 2100$ , а при другом направлении  $Re^* = 3200$ . Эксперименты проведены на установке “ЛЭМПУС-2” [6] Новосибирского госуниверситета. Схема экспериментальной установки приведена на рис. 1. Установка оснащена турбомолекулярной и криогенной откачкой, электронно-пучковой диагностикой, масс-спектрометром, датчиками давления и расхода.

В экспериментах исследовалось истечение аргона из трубы (2, рис. 2). Диапазон давлений на входе в трубу 10–160 кПа. Температура газа и трубы – комнатная (297–298 К). Истечение происходило в вакуумную камеру при давлении 0.1–1 Па. Анализ процессов нуклеации осуществляется с помощью масс-спектрометра. Параметры встроенного электронного пучка: энергия электронов 70 эВ, ток – 150 мкА. Сопоставление характера нуклеации при ламинарном и турбулентном режиме течения осуществлялось при изменении направления движения газа в трубе. Для этого вход и выход трубы менялись местами.

На рисунке 2 приведена фазовая диаграмма для аргона. Непрерывная линия соответствует фазовому равновесию конденсированной и газообразной фаз аргона [7]. Течение газа в трубе не является адиа-

<sup>1)</sup>e-mail: sergeynovopashin@gmail.com

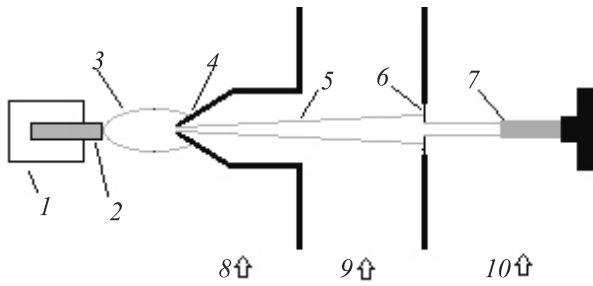


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема экспериментальной установки: 1 – 4-х-координатное прецизионное устройство перемещения; 2 – капилляр; 3 – истекающая струя газа; 4 – скиммер; 5 – невозмущенный поток атомов или молекул; 6 – коллимирующая диафрагма; 7 – вход масс-спектрометра Hiden EPIC 1000; 8 – камера расширения; 9 – послескиммерная камера; 10 – камера масс-спектрометра

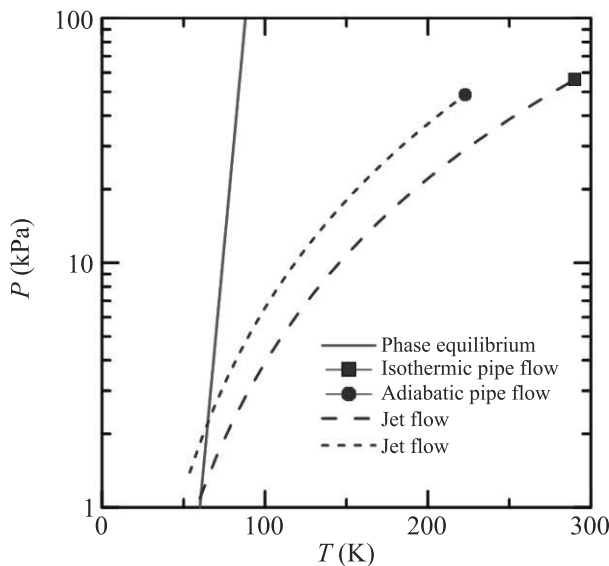


Рис. 2. (Цветной онлайн) Диаграмма фазового состояния аргона

батическим за счет теплообмена с трубкой. Поэтому реальные параметры на выходе из трубы находятся где-то между изотермическим и адиабатическим режимом. Для характерного давления на входе в трубу 100 кПа на рис. 2 показаны параметры газа на выходе из трубы для изотермического ( $T = 298$  К,  $P = 56$  кПа, символ – квадратик) и адиабатического ( $T = 223$  К,  $P = 49$  кПа, символ – кружок) течения в трубе. Из рисунка 2 видно, что в условиях настоящих экспериментов кривая равновесия не достигается в трубе, а собственно процесс нуклеации начинается по мере охлаждения уже в свободной струе. Для оценки области пересечения параметров расширяющегося потока с кривой фазового равновесия пред-

ставлены две кривые, показанные штриховыми линиями. Короткие штрихи соответствуют адиабатическому течению в трубе, а длинные штрихи – изотермическому течению в трубе. Из рисунка 2 видно, что пересечение происходит при температуре около 60 К и диапазоне давлений 1–2 Па. Расстояние, на котором достигается этот уровень давления, составляет несколько калибров ( $x/d = 3 \div 6$ ). Оценка сделана по адиабате расширения с учетом того, что плотность газа падает обратно пропорционально квадрату расстояния от выхода трубы.

На рисунке 3 приведены зависимости расхода газа от давления на входе трубы при различном на-

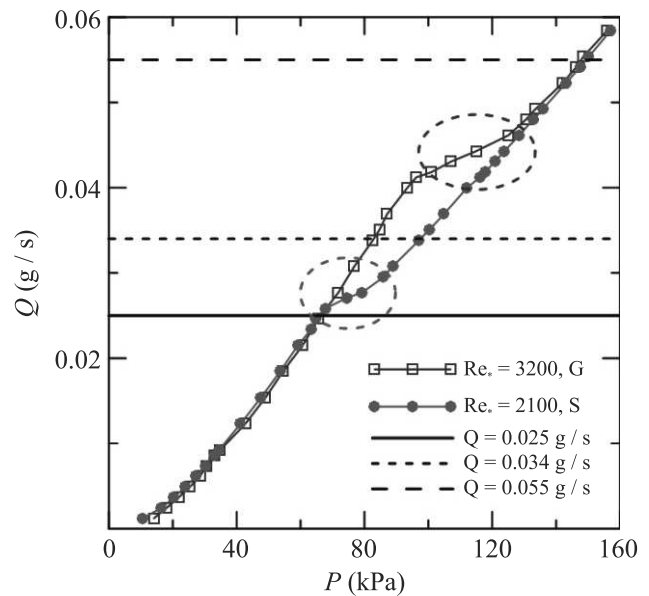


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость расхода газа от давления

правлении движения газа в трубе. На начальном участке течения (до давления примерно 70 КПа) оба течения ламинарные и кривые практически совпадают. При дальнейшем повышении давления для одного из направлений трубы происходит переход к турбулентному режиму течения (критическое число Рейнольдса составляет 2100). Для другого направления течения газа переход происходит при большем давлении (примерно 100 КПа) и, соответственно, при большем числе Рейнольдса – 3200. Для удобства, на рис. 3 и далее по тексту, течение с малым критическим числом Рейнольдса будем обозначать буквой S (small), а течение с большим критическим числом Рейнольдса – G (great). Отметим, что более плавный режим перехода к турбулентному режиму для течения S связан с тем, что критическое число Рейнольдса близко к границе устойчивости ламинарного

течения. В областях расходов и давлений, отмеченных пунктирными эллипсами, измеренные значения давления и расхода не являются корректными. Причина состоит в том, что эти области соответствуют режиму перемежаемости и, например, попытка установить определенный расход приводит к колебаниям давления на десятки процентов. Отмеченные экспериментальные точки в этих областях являются некоторыми осредненными характеристиками. В то же время, как в области ламинарного, так и в области развитого турбулентного течения расход и давление имеют конкретные значения.

Исследование спектра кластеров проведено на расстоянии 110 мм от конца трубы до скиммера системы молекулярно-пучковой масс-спектрометрии. Это расстояние соответствует свободно молекулярному течению, при котором дальнейший рост кластеров практически не происходит. На рисунке 4 при-

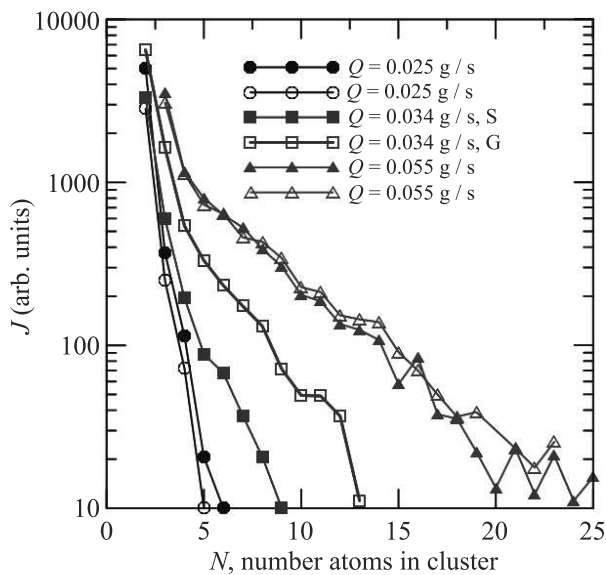


Рис. 4. (Цветной онлайн) Масс-спектры кластеров для различных режимов течения

ведены результаты измерений для обоих течений при одинаковых расходах (см. рис. 3): 1) оба течения ламинарные (светлые и темные кружки),  $Q = 0.025$  г/с; 2) оба режима турбулентные (светлые и темные треугольники),  $Q = 0.055$  г/с; 3) смешанный режим (светлые и темные квадраты),  $Q = 0.034$  г/с. В последнем случае течение G – ламинарное, течение S – турбулентное. На рисунке 4 представлены масс-спектры для указанных выше режимов. Из рисунка 4 видно, что как для обоих ламинарных режимов, так и обоих турбулентных режимов спектры практически совпадают. Однако, смешанный режим показывает, что формирование кластеров существенно различается: интенсивность потока кластеров в ла-

минарном режиме существенно превышает соответствующую величину для турбулентного режима.

Явление подавления формирования зародышей новой фазы наглядно видно на рис. 5, где представ-

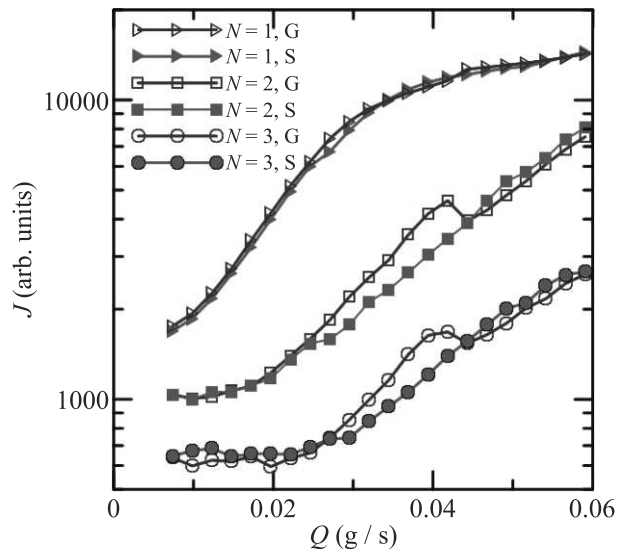


Рис. 5. (Цветной онлайн) Зависимость интенсивности мономеров ( $N = 1$ ), димеров ( $N = 2$ ) и тримеров ( $N = 3$ ) от расхода

лены зависимости интенсивности мономеров, димеров и тримеров при изменении расхода газа. Отметим, что для удобства анализа, интенсивность мономерной компоненты была уменьшена единым множителем для обеих кривых примерно на два порядка. После ламинарно-турбулентного перехода для течения S, зависимости для димеров и тримеров начинают расходиться вплоть до ламинарно-турбулентного перехода для течения G. Переход к турбулентному режиму в течении G приводит к падению интенсивности как димеров, так и тримеров до значений, соответствующих уже турбулентному течению S. Этот факт позволяет сделать вывод о том, что именно турбулентный характер течения в трубе приводит к подавлению процесса нуклеации.

**Обсуждение.** Отметим две вероятные физические причины наблюдаемого явления. Во-первых, это возможная разница температур при ламинарном и турбулентном режиме течения. Это связано как с отличием теплообмена со стенкой трубы, так и диссипацией вязких напряжений. Кроме того, поперечные профили скорости в выходном сечении существенно отличаются для ламинарного (параболический) и турбулентном (близкий к однородному) режима течения. Во-вторых, в ламинарном режиме процесс нуклеации происходит в стационарных условиях, а в турбулентном режиме течения в трубе флуктуа-

ции плотности и температуры могут достигать пространственной области нуклеации, вследствие относительно медленных процессов диффузии и теплопроводности [8]. В последнем случае процесс нуклеации осуществляется в неоднородном по пространству и нестационарном потоке, определяемом турбулентными флуктуациями. В завершение этой части, хотелось бы отметить, что строгий теоретический анализ всех процессов на данном этапе затруднен, что в большей степени относится к турбулентному режиму течения.

**Заключение.** В работе представлены результаты экспериментального исследования начальной стадии конденсации аргона при истечении в вакуум. Проведены масс-спектрометрические измерения спектра кластеров при ламинарном и турбулентном истечении аргона из длинной круглой трубы. Экспериментально обнаружено новое явление: подавление процесса зародышеобразования конденсированной фазы при турбулентном течении в трубе.

Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП “Прикладная физика” физического факультета НГУ. Авторы благодарны А. Е. Зарвину за предоставленные возможности для проведения работ и полезные обсуждения.

**Финансирование работы.** Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект # 22-11-00080.

**Конфликт интересов.** Конфликт интересов отсутствует.

- 
1. O. F. Hagena and W. Obert, *J. Chem. Phys.* **56**, 1793 (1972).
  2. А. Е. Иешкин, А. Б. Толстогузов, Н. Г. Коробейщиков, В. О. Пеленович, В. С. Черныш, *УФН* **192**, 192 (2022).
  3. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Statistical physics*, Oxford, Pergamon Press (1980).
  4. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Fluid mechanics*, Pergamon Press, Oxford (1987).
  5. K. Avila, D. Moxey, Alberto de Lozar, M. Avila, D. Barkley, and B. Hof, *Science* **333**, 192 (2011).
  6. А. Е. Зарвин, V. V. Kalyada, V. Zh. Madirbaev, N. G. Korobeishchikov, M. D. Khodakov, A. S. Yaskin, V. E. Khudozhnikov, and S. F. Gimelshein, *IEEE Trans. Plasma Sci.* **45**, 819 (2017).
  7. *Таблицы физических величин. Справочник*, под ред. акад. И. К. Кикоина, Атомиздат, М. (1976), 1008 с.
  8. С. А. Новопашин, А. Л. Перепелкин, В. Н. Ярыгин, *Письма в ЖЭТФ* **44**, 318 (1986).

# О насыщении неустойчивости индуцированного рассеяния обыкновенной СВЧ волны в транспортном барьере токамака при электронном циклотронном нагреве плазмы

Е. З. Гусаков, А. Ю. Попов<sup>1)</sup>

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

Поступила в редакцию 19 февраля 2024 г.

После переработки 4 марта 2024 г.

Принята к публикации 7 марта 2024 г.

Рассмотрено насыщение низкопороговой параметрической распадной неустойчивости обыкновенной волны при электронном циклотронном резонансном нагреве в периферийном транспортном барьере токамака в результате стохастического затухания дочерней двумерно-локализованной косої ленгмюровской волны. Установлено, что в современных установках насыщение неустойчивости происходит на относительно низком уровне, не оказывая влияния на энергобаланс при нагреве плазмы. Показано, что для предполагаемых условий ввода сверхвысокоочастотной мощности в токамаке-реакторе ITER эффективность нелинейной накачки будет превосходить максимальную эффективность стохастического затухания, что приведет к срыву амплитудно-зависимого насыщения и может вызвать значительную модификация профиля энерговыведения.

DOI: 10.31857/S123456782407005X, EDN: TSENXX

Параметрические распадные неустойчивости (ПРН) – пороговое нелинейное явление, которое часто встречается в различных плазменных средах. В неоднородной плазме порог возбуждения ПРН, как правило, определяется эффективностью нелинейного усиления дочерних волн, покидающих с групповой скоростью конечную вдоль направления неоднородности область взаимодействия, где выполнены распадные условия для волновых векторов [1]. Теоретический анализ поведения сверхвысокоочастотных (СВЧ) волн, которые используются для дополнительного электронного циклотронного резонансного нагрева (ЭЦРН) плазмы в тороидальных термоядерных установках, предсказал крайне высокие, – от десятков МВт до ГВт, в зависимости от типа распада, – порог их возбуждения [2]. Это, казалось бы, делает невозможным наблюдение нелинейных аномальных явлений в современных ЭЦРН экспериментах, оперирующих мегаваттными СВЧ пучками. Однако, обнаруженные недавно аномальное рассеяние греющего СВЧ излучения [3–5], излучение плазмы на полудельных гармониках частоты СВЧ генератора [4], генерация групп высокоэнергичных ионов при ЭЦРН [6] и уширение профиля энерговыведения электронных циклотронных (ЭЦ) волн [7–9] свидетельствуют о нелинейном

поведении СВЧ волн в плазме тороидальных ловушек. Физические явления, о которых докладывалось в работах [3–7], наблюдались, когда пучок греющего излучения проходил через область плазмы с монотонным профилем плотности. Как предсказывает модель низкопороговой ПРН [10], в этом случае СВЧ волна распадается на дочерние волны, как минимум одна из которых оказывается локализованной в области распада, причем порог этого явления существенно меньше мощности СВЧ генератора (гиротрона). Это модель позволяет детально количественно объяснить аномальные явления при ЭЦРН, примером чему служат работы [11–13], и предсказать значительный уровень аномального поглощения СВЧ мощности. Следует отметить, что уширение профиля энерговыведения при ЭЦРН наблюдалось и при монотонном профиле плотности плазмы [8, 9]. Одна из моделей, которая позволяет предсказать возбуждение ПРН при монотонном профиле плотности, – теория низкопороговой ПРН СВЧ волны в периферийном транспортном барьере (ПТБ) [14–16]. На первый взгляд, конвективные потери дочерних волн в этой области должны быть максимальными и выводы теоретического анализа [2] должны быть обоснованы. Однако, существование зон прозрачности для волн промежуточного диапазона частот в областях плазмы с большим градиентом плотности [17], где возможна

<sup>1)</sup>e-mail: a.popov@mail.ioffe.ru

их локализация в пределах транспортного барьера, делает возможным низкопороговое параметрическое возбуждение таких локализованных колебаний [15]. Этот сценарий особенно актуален для распада обыкновенной волны, который приводит к появлению аномально рассеянных обыкновенных волн и косых ленгмюровских волн (КЛВ), запертых в направлении плазменной неоднородности и в тороидальном направлении из-за гофрировки магнитного поля. Возбуждение этой неустойчивости может приводить к уширению области выделения энергии при ЭЦРН, которое определяется уровнем ее насыщения.

В настоящей работе показано, что в современных тороидальных установках насыщение этой низкопороговой ПРН происходит из-за амплитудозависимого “стохастического” затухания локализованной дочерней КЛВ [18], физический механизм которого может быть пояснен следующим образом. Проекция траектории движения иона на плоскость перпендикулярную магнитному полю состоит из четырех частей: двух областей, где фазовая скорость КЛВ поперек магнитного поля совпадает с проекцией скорости частицы в этом направлении и происходит взаимодействие волна-частица по механизму Ландау, и двух дуг, соединяющих эти области. В случае КЛВ малой амплитуды (в линейном приближении) это взаимодействие приводит к ускорению иона и к затуханию волны лишь при совпадении ее частоты и какой-то гармоники ионно-циклотронной частоты. В противном случае прирост энергии иона при многократном прохождении областей резонанса онуляется. В случае же КЛВ, амплитуда которой превосходит некоторое пороговое значение, возмущение его вращения иона по ларморовой окружности приводит к стохастизации движения, изменению энергии иона и, в конечном счете, к затуханию КЛВ, зависящему от его амплитуды [18,19]. При значительном превышении этого порога затухание КЛВ достигает значения затухания по механизму Ландау в плазме без магнитного поля. В результате баланса амплитудозависимого затухания КЛВ и нелинейной накачки в системе трех взаимодействующих волн в области распада достигается равновесие. Кроме того, делается вывод, что для предполагаемых условий мощного ЭЦРН в токамаке-реакторе ИТЕР эффективность нелинейной накачки может превзойти максимально возможную эффективность стохастического затухания, что приведет к срыву квазилинейного насыщения и может вызвать значительную модификацию профиля энерговыведения.

Чтобы описать процесс насыщения низкопороговой ПРН обыкновенной волны при ЭЦРН в периферийном транспортном барьере токамака, введем локальную декартову систему координат  $(x, y, z)$ , где координата  $x$  – вдоль направления неоднородности,  $y$  – перпендикулярна линии магнитного поля и  $z$  – вдоль линии магнитного поля. В узком слое, где происходит распад,  $B = \bar{B}(1 - \delta(x) \cos(Nz/qR))$ ,  $\bar{B}$  – среднее значение магнитного поля на магнитной поверхности,  $N$  – количество тороидальных катушек,  $R$  – большой радиус установки,  $q$  – локальный запас устойчивости, и  $\delta$  – параметр, характеризующий величину гофрировки магнитного поля. Например, для установки ИТЕР:  $R = 6.2$  м,  $N = 36$  – число полоидальных катушек,  $\delta = 0.5\%$  [20]. Далее, рассмотрим ПРН обыкновенной волны, которая распространяется в экваториальной плоскости токамака, где максимальна гофрировка магнитного поля, вдоль координаты внутрь плазмы. В ВКБ (Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна) приближении ее электрическое поле имеет вид

$$\mathbf{E}_0(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{e}_z A_0}{2n_{0x}(x)^{1/2}} \exp\left(\int_0^x k_{0x}(x') dx' - i\omega_0 t\right) + \text{c.c.},$$

$$A_0 = \sqrt{\frac{8P_0}{cw^2}} \exp\left(-\frac{y^2 + z^2}{2w^2}\right), \quad (1)$$

где  $P_0$  – мощность волны,  $w$  – радиус пучка,  $n_{0x} = n_x(\omega_0) = \sqrt{\eta(\omega_0)}$  – показатель преломления. Рассмотрим дочерние локализованную КЛВ и рассеянную в сторону и поляризованную вдоль  $\mathbf{e}_z$  обыкновенную волну  $E_s$ , амплитуды которых описываются системой уравнений [16]

$$\begin{cases} \Delta_{\perp} E_s + \frac{\omega_s^2}{c^2} \eta(\omega_s) E_s = -i\xi_{nl} \frac{\omega_s}{c} E_0^* \Delta_{\perp} \varphi_L, \\ \hat{D}(\omega_L) \varphi_L = i\xi_{nl} \frac{c}{\omega} \Delta_{\perp} E_0 E_s, \end{cases} \quad (2)$$

где  $\omega_0 = \omega_L + \omega_s$ ,  $\hat{D}(\omega_L) = \varepsilon(x, z)(\partial_{xx} + \partial_{yy}) + i\partial_x g(x, z)\partial_y + \eta(x)\partial_{zz}$ ,  $\xi_{nl} = \omega_{pe}^2 / (\omega_0 \omega_{ce} \bar{B})$  – коэффициент нелинейной связи дочерних волн в присутствии волны накачки,  $\omega_{ce}$  и  $\omega_{pe}$  – электронная циклотронная и плазменная частоты,  $\varepsilon$ ,  $g$  и  $\eta$  – компоненты тензора диэлектрической проницаемости холодной плазмы. Будем искать ВКБ решение первого из уравнений (2)

$$E_s(\mathbf{r}) = \sum_{j=\pm} \frac{A_s^j(x)}{2\sqrt{n_{sx}(q_y, x)}} \times \exp\left(j \cdot i \int_0^x k_{sx}(q_y, x') dx' + i q_y + i \omega_s t\right) + \text{c.c.} \quad (3)$$

Тогда ее медленно меняющаяся в области взаимодействия амплитуда равна

$$A_s^\pm = -i\xi_{nl} \frac{\omega_s}{c} \exp(-iq_y y) G_s^\pm \{ \tilde{\Delta}_\perp A_0 \varphi \}, \quad (4)$$

где  $\tilde{\Delta}_\perp = \partial_{xx} - q_y^2$  и функция Грина  $G_s^j$ , где  $j = \pm$  – рассеяние назад/вперед, задается выражением

$$G_s^\pm \{ \dots \} = \frac{i}{\sqrt{n_{0x}(x)n_{sx}(x)}} \frac{c}{2\omega_c} \times \\ \times \exp \left( -i \int^x k_{0x}(x'') dx'' \right) \int_x^\infty \frac{dx'}{\sqrt{n_{0x}(x')n_{sx}(x')}} \dots \\ \dots \exp \left( -i \int_x^{x'} (k_{0x}(x'') \pm k_{sx}(q_y^*, x'')) dx'' \right).$$

Подставляя (3) в правую часть второго уравнения (2), получаем уравнение для потенциала КЛВ

$$\hat{D}_L \varphi_L = \xi_{nl}^2 \tilde{\Delta}_\perp \left( \sum_{j=\pm} G_s^j \{ \tilde{\Delta}_\perp (A_0^* \varphi_L) \} \right). \quad (5)$$

Далее, нижний индекс  $s$  относится к дочерней рассеянной обыкновенной волне, а индекс  $L$  – к дочерней КЛВ. Решение уравнения (5) мы будем искать, используя процедуру теории возмущений [16]. На первом шаге пренебрежем нелинейной накачкой и представим искомым потенциал в следующем виде

$$\varphi_L(\mathbf{r}) = C_L f_m(K_x(x - x_{\max})) \times \\ \times f_n(K_z z) \exp(iq_y y + i\omega_L t)/2 + \text{с.с.} \quad (6)$$

где собственные функции описывается полиномами Эрмита [14–16]

$$f_m(Kx) = \sqrt{K/(\sqrt{\pi} 2^m m!)} \exp(-K^2 x^2/2) H_m(Kx),$$

$$K_x = |\kappa_0 q_y / l_x^2|^{1/4}, \quad K_z = K_z |l_z^2 |\eta(\omega_L)| / l_x^2|^{-1/4},$$

$$\kappa(x) = \partial_x g / \varepsilon, \quad \kappa_0 = \kappa(\omega_L, x_{\max}),$$

$$l_j^{-2} = \partial_{jj} \kappa |_{x_{\max}} / (2\kappa_0), \quad j = x, z.$$

Координата  $x_{\max}$  соответствует максимуму функции  $\partial_x g \propto \partial_x n_e$  вдоль координаты  $x$ , собственная частота является решением дисперсионного уравнения  $D(\omega_L^{m,n}) = \varepsilon(\kappa_0 q_y - q_y^2 - (2m+1)K_x^2) + (2n+1)|\eta| K_z^2 = 0$  [14–16] и

$$q_y = \kappa(\omega_L^{m,n})/2. \quad (7)$$

При условии (7) КЛВ в пределах области локализации вдоль направления неоднородности меняет знак групповой скорости  $v_{gy} = \partial_{q_y} D'_L / D_{\omega_L} |_{\omega_L^{m,n}}$ ,  $D_{\omega_L} =$

$\partial_{\omega_L} D'_L$ , в направлении  $y$ , т.е. средняя групповая скорость  $\int_{-\infty}^{\infty} v_{gy}(x) |f_m(x)|^2 dx \approx 0$  и единственным механизмом потери энергии из области распада в направлении  $y$  является дифракция – более медленный процесс, чем конвективный вынос. Поэтому КЛВ с полоидальным числом волны, близким к значению (7), наиболее неустойчивы и возбуждаются в первую очередь. Нелинейное взаимодействие и дифракционная потеря энергии делают амплитуду  $C_L$  переменной величиной:  $C_L \rightarrow C_L(t, y)$ . Подставим (6) в (5), умножим обе его части на  $f_m(K_x x)^* f_n(K_z z)^*$  и проинтегрируем по координатам  $x$  и  $z$ . Кроме того, учтем “стохастическое” затухание КЛВ [18]. В результате получим следующее уравнение

$$\frac{\partial b_p}{\partial t} - i\Lambda_{py} \frac{\partial^2 b_p}{\partial y^2} = \gamma_0 b_p \exp\left(-\frac{y^2}{w^2}\right) - \nu_d(b_p) b_p, \quad (8)$$

где  $b_m$  – безразмерная амплитуда КЛВ, определяемая соотношением  $C_L = \sqrt{16\sqrt{\pi} T_e / (\omega_L < D_{\omega_L} > w)} b_m$ ,  $\Lambda_{py} = < \varepsilon(\omega_L) > / < D_{\omega_L} >$  – коэффициент дифракции,  $\gamma_0 = iQ^2 |< D_{\omega_L} >|^{-1}$  – инкремент неустойчивости в случае широкой накачки и в отсутствие затухания,

$$Q^2 = \frac{\omega_{pe}^4 (k_{sx}^2 + q_y^2)^2}{\omega_0^2 \omega_{ce}^2} \frac{2P_0}{cn_{0x} w^2 \bar{B}^2} \Big|_{x_m} \times$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz |f_n(z)|^2 \exp\left(-\frac{z^2}{w^2}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dx f_m(x)^* \times$$

$$\times \sum_{j=\pm} G_s^j \left\{ \exp\left(i \int_{x'}^x (k_{0x} + jk_{sx}) dx''\right) f_m(x') \right\},$$

$\nu_d = \nu_L \left( 1 + \exp\left(-\frac{|b_p|^2 - |b_p^{th}|^2}{\Delta}\right) \right)$  – коэффициент стохастического (амплитудо-зависимого) затухания [19],  $\nu_L = \frac{2\sqrt{\pi}}{\omega_L < D_{\omega_L} >} \frac{\omega_{pi}^2}{v_{ti}^2} \frac{\omega_L}{|q_{Lx} v_{ti}|} \exp\left(-\frac{\omega_p^2}{q_{Lx}^2 v_{ti}^2}\right)$  – декремент затухания Ландау без магнитного поля,

$$b_p^{th} = \sqrt{\frac{w}{16\sqrt{\pi} |f_m(0)|^2 |f_n(0)|^2} \frac{\bar{B}^2 \omega_L < D_{\omega_L} >}{q_{Lx}^2}} \times \\ \times \left( \frac{\omega_{ci}}{\omega_p} \right)^{1/3} \frac{\omega_p}{q_{Lx} c} \quad (9)$$

– пороговое значение амплитуды КЛВ, при котором поведение иона в ее поле становится стохастическим и  $\Delta \ll |b_p^{th}|^2$  – ширина области перехода в стохастический режим. Коэффициент стохастического затухания равен нулю при  $|b_p^{th}|^2 - |b_p|^2 \gg \Delta$  и совпадает с коэффициентом затухания Ландау в плазме без магнитного поля при  $|b_p|^2 - |b_p^{th}|^2 \gg \Delta$ . Уравнение (8)



описывает параметрическое возбуждение собственных мод КЛВ. На начальной стадии неустойчивости амплитуда КЛВ много меньше порогового значения (9). В этом случае  $\nu_d = 0$  и при мощности пучка, которая значительно превышает пороговое значение для неустойчивости, уравнение (8) имеет приближенное решение  $b_m(y, t) = f_p(K_y y) \exp(\gamma_p t + i\delta\omega_p t)$  [16], где поправка к собственной частоте и инкремент неустойчивости моды  $p$  определяются выражением

$$\begin{aligned} (\gamma_p; \delta\omega_p) &= (\gamma_0'; \gamma_0'') - \\ &- \left( \cos\left(\frac{\arg \gamma_0}{2} - \frac{\pi}{4}\right); \sin\left(\frac{\arg \gamma_0}{2} - \frac{\pi}{4}\right) \right) \times \\ &\times \sqrt{|\gamma_0|} (2p+1) \sqrt{\frac{\Lambda_{py}}{w^2}} \end{aligned} \quad (10)$$

и  $K_y^{-1} = \Lambda_{py}^{1/4} w^{1/2} \exp(-i\pi/8 - i \arg \gamma_0/4) \sqrt[4]{\gamma_0}$ . В результате экспоненциального роста амплитуда дочерней волны становится больше порогового значения (9), что приводит к возникновению стохастического затухания. В этом случае можно ожидать существование квазистационарного решения (8) в области распада, которое определяется балансом первого и второго членов в правой части уравнения (8), т.е.  $\nu_d(b_p^{\text{sat}}) \approx \gamma_0$ . Таким образом, можно ожидать, что насыщение неустойчивости происходит на уровне плотности энергии дочерней волны в пределах пучка порядка

$$w_p(0) = |b_p|^2 \approx w_p^{\text{sat}} = |b_p^{\text{th}}|^2 - \Delta \ln(\nu_L/\gamma_0 - 1). \quad (11)$$

Отметим, что полученная оценка имеет смысл лишь при условии  $\nu_L/\gamma_0 > 1$ , что позволяет усомниться в возможности насыщения неустойчивости по обсуждаемому механизму при выполнении противоположного условия. В результате дифракции (второй член в левой части уравнения (8)) происходит вынос энергии КЛВ из области взаимодействия, что должно приводить к формированию стационарного состояния. Это позволяет ожидать наличие квазистационарного уровня дочерней волны (11) в области взаимодействия и увеличения энергии КЛ волны за пределами этой области. Используя (4) и введенные выше обозначения, оценим мощность рассеянной обыкновенной волны  $P_s$  на стадии насыщения неустойчивости как

$$\begin{aligned} P_s &= \frac{\omega_s}{\omega_L} \times 2\text{Im}(\gamma_0) T_e \langle w_p \rangle_{pdi}, \\ \langle w_p \rangle_{pdi} &= \int_{-\infty}^{\infty} w_p(y) \exp\left(-\frac{y^2}{w^2}\right) \frac{dy}{\sqrt{\pi}w}. \end{aligned} \quad (12)$$

Далее, решим уравнение (8) численно. Возьмем коэффициенты этого уравнения, которые соответствуют сценарию ПРН, проиллюстрированному на рис. 1, где показаны сумма волновых векторов

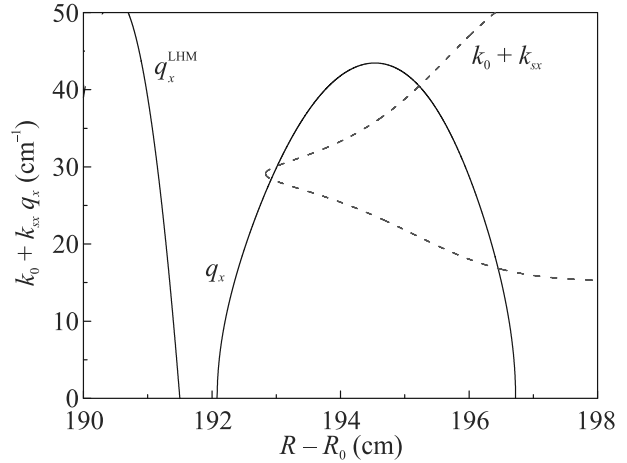


Рис. 1. (Цветной онлайн) Сумма волновых векторов  $k_{0x} + k_{sx}(q_y)$  СВЧ волн (пунктирная линия) и волновой вектор  $q_x$  и  $q_x^{\text{LHM}}$  (сплошная линия) – волновые вектора КЛВ и нижнегибридной волны в окрестности НГР;  $f_0 = 170$  ГГц,  $f_s = 168.8$  ГГц,  $q_y = 28.9$  см $^{-1}$

$k_{0x} + k_{sx}(q_y)$  обыкновенных волн ( $f_0 = 170$  ГГц,  $f_s = 168.8$  ГГц, пунктирная линия) и волновой вектор КЛВ  $q_x = q_x(q_y)$  ( $q_y = 28.79$  см $^{-1}$ , сплошная линия). Сплошной линией показан также волновой вектор нижнегибридной (НГ) волны  $q_x^{\text{LHW}}$ , которая отделена от локализованной КЛВ областью непрозрачности. Возьмем область интегрирования, размеры которой много больше размеров пучка волн накачки. Будем предполагать периодические граничные условия на границах этой области и начальный уровень КЛВ, определяемый тепловыми флуктуациями, т.е.  $|b_p|^2 = 1$ . Результаты численного решения для условий установки ITER, экваториального ввода пучка обыкновенных волн радиусом  $w = 3$  см и типичной мощностью  $P_0 = 1$  МВт, представлены на рис. 2, где показана эволюция распределения плотности энергии дочерней КЛ волны. В нижнем окне показано распределение плотности энергии дочерней КЛВ в разные моменты времени в режиме насыщения. Стрелка показывает, что с течением времени происходит дифракционное расплывание распределения КЛ волны, в то время как в области распада поддерживается уровень (11). Для использованных параметров порог возбуждения неустойчивости равен  $P_0^{\text{th}} = 347$  кВт. Используя (12) и полученные численно данные  $b_p(y)$ , можно определить долю мощности, – порядка 3 кВт, – которую уносит с со-

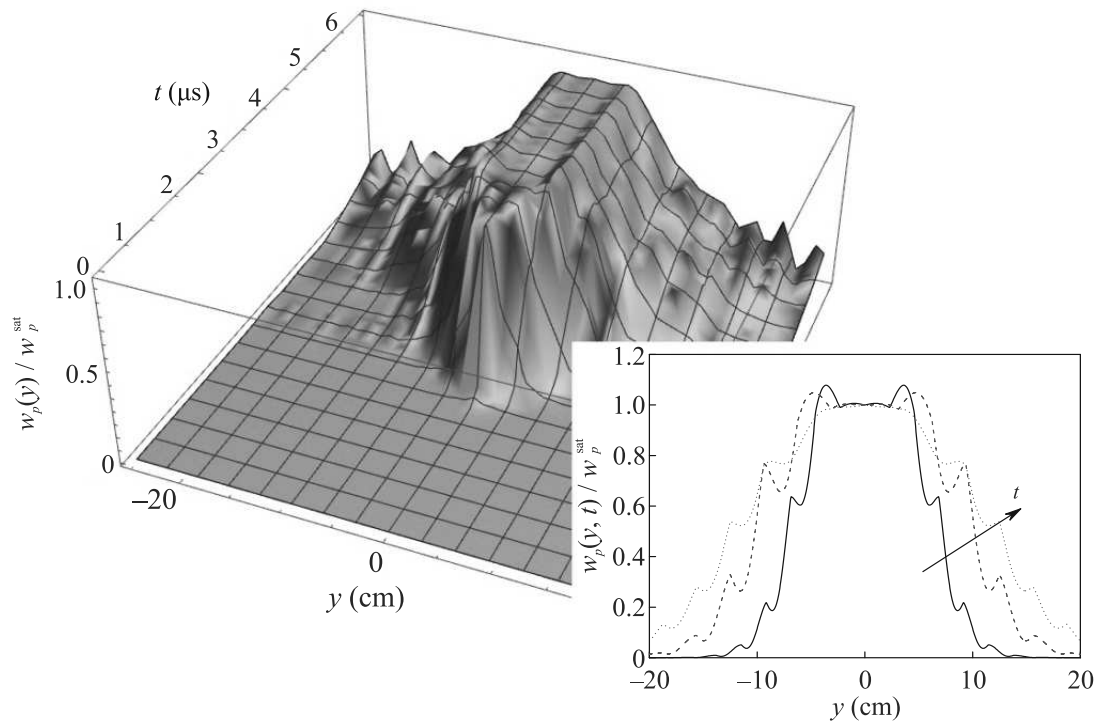


Рис. 2. (Цветной онлайн) Эволюция распределения плотности энергии дочерней КЛВ. На вставке – распределения плотности энергии дочерней КЛВ в разные моменты времени в режиме насыщения. Стрелка показывает, что с течением времени происходит дифракционное расплывание распределения КЛВ

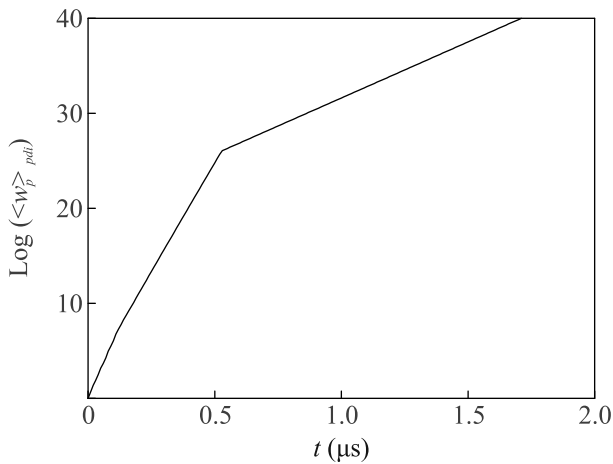


Рис. 3. В полу-логарифмическом масштабе показана эволюция плотности энергии КЛВ в области распада (см. (12)),

бой из области распада дочерняя обыкновенная волна. Видно, что насыщение неустойчивости происходит на относительно низком уровне, не оказывая существенного влияния на энергобаланс при нагреве плазмы.

Следует, однако, отметить, что в настоящее время обсуждается повышение СВЧ мощности для

ЭЦРН, вводимой в ITER через 8 портов, до уровня 60 МВт. При этом можно ожидать раскачки неустойчивой КЛВ под действием существенно большей мощности накачки, чем 1 МВт. На рисунке 3 в полу-логарифмическом масштабе показана эволюция плотности энергии КЛВ в области распада для СВЧ пучка мощностью  $P_0 = 4$  МВт. “Излом” на зависимости происходит в момент перехода взаимодействия волна-частица (ион) в стохастический режим. Поскольку эффективность нелинейной накачки превосходит эффективность стохастического затухания (порог этого режима определяется из условия  $\gamma_0(P_0^{th2} = \nu_L$  и равен при рассматриваемых параметрах  $P_0^{th2} = 3.4$  МВт), последнее только уменьшает скорость экспоненциального роста, но не может привести к насыщению ПРН. Можно ожидать, что эффективными механизмами насыщения неустойчивости при этом окажутся истощение волны накачки и каскад распадов КЛВ. Насыщение ПРН при этом будет происходить на несравненно более высоком уровне, чем из-за стохастического амплитудно-зависимого механизма затухания КЛВ, что значительно модифицирует профиль энерговыделения по сравнению с предполагаемым в рамках линейной модели распространения СВЧ волны.

Обнаруженный эффект второго порога, при превышении которого стохастическое затухание не способно ограничить развитие неустойчивости, необходимо учитывать при планировании ЭЦРН экспериментов на токамаке ITER. Он может оказаться важным и при мощном ЭЦРН на других установках. Таким образом, становятся актуальными задачи экспериментального моделирования развития и насыщения рассмотренной в статье неустойчивости индуцированного рассеяния и поиска путей стабилизации этого нелинейного явления (см., к примеру, работу [21]).

**Финансирование работы.** Аналитическое исследование финансировалось в рамках гранта Российского научного фонда # 22-12-00010, численное моделирование – при поддержке государственного контракта Физико-технического института им. А. Ф. Иоффе # FFUG-2024-0028, а код для моделирования параметрической распадной неустойчивости разработан при поддержке государственного контракта Физико-технического института им. А. Ф. Иоффе # 0034-2021-0003.

**Конфликт интересов.** Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

1. A. D. Piliya, in *Proc. of the 10th Intern. Conf. on Phenomena in Ionized Gases, September 13-18, 1971, Oxford, England*, ed. by R. N. Franklin, Donald Parsons and Co., Oxford (1971), p. 320.
2. A. G. Litvak, A. M. Sergeev, E. V. Suvorov, M. D. Tokman, and I. V. Khazanov, *Phys. Fluids*, **5**, 4347 (1993).
3. E. Westerhof, S. K. Nielsen, J. W. Oosterbeek, M. Salewski, M. R. De Baar, W. A. Bongers, A. Bürger, B. A. Hennen, S. B. Korsholm, F. Leipold, D. Moseev, M. Stejner, and D. J. Thoen, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 125001 (2009).
4. S. K. Hansen, S. K. Nielsen, J. Stober, J. Rasmussen, M. Stejner, M. Hoelzl, T. Jensen, and the ASDEX Upgrade team, *Nucl. Fusion* **60**, 106008 (2020).
5. A. Tancetti, S. K. Nielsen, J. Rasmussen et al. (Collaboration), *Nucl. Fusion* **62**, 074003 (2022).
6. M. Martinez, B. Zurro, A. Baciero, D. Jiménez-Rey, and V. Tribaldos, *Plasma Phys. Control. Fusion* **60**, 025024 (2018).
7. E. Z. Gusakov, A. Yu. Popov, A. I. Meshcheryakov, I. A. Grishina, and M. A. Tereshchenko, *Phys. Plasmas* **30**, 122112 (2023).
8. Yu. N. Dnestrovskij, A. V. Melnikov, D. Lopez-Bruna, A. Yu. Dnestrovskij, S. V. Cherkasov, A. V. Danilov, L. G. Eliseev, P. O. Khabanov, S. E. Lysenko, and D. Yu. Sychugov, *Plasma Phys. Control. Fusion* **65**, 015011 (2023).
9. J. H. Slief, R. J. R. van Kampen, M. W. Brookman, J. van Dijk, E. Westerhof, and M. van Berke, *Nucl. Fusion* **63**, 026029 (2023).
10. E. З. Гусаков, А. Ю. Попов, *УФН* **190**, 396 (2020).
11. E. Z. Gusakov, A. Yu. Popov, and P. V. Tretinnikov, *Nucl. Fusion* **59**, 106040 (2019).
12. E. Z. Gusakov and A. Yu. Popov, *Plasma Physics Reports* **49**, 949 (2023).
13. E. Z. Gusakov and A. Yu. Popov, *Plasma Physics Reports* **49**, 194 (2023).
14. E. З. Гусаков, А. Ю. Попов, *Письма в ЖЭТФ* **114**, 167 (2021).
15. E. Z. Gusakov and A. Yu. Popov, *Phys. Rev. Lett.* **128**, 065001 (2022).
16. E. З. Гусаков, А. Ю. Попов, *Физика плазмы* **48**, 783 (2022).
17. E. Z. Gusakov, M. A. Irzak, and A. D. Piliya, *JETP Lett.* **65**, 25 (1997).
18. C. F. F. Karney, *Phys. Fluids* **21**, 1584 (1978).
19. C. F. F. Karney, *Phys. Fluids* **22**, 2188 (1979).
20. N. Mitchell and A. Devred, *Fusion Engineering and Design* **123**, 17 (2017).
21. E. Z. Gusakov and A. Yu. Popov, *Phys. Plasmas* **30**, 062104 (2023).

# Аномальный эффект Джозефсона в планарной гибридной структуре со спин-орбитальным взаимодействием<sup>1)</sup>

А. В. Самохвалов<sup>2)</sup>

Институт физики микроструктур РАН, 603950 Н. Новгород, Россия

Нижегородский госуниверситет им. Н. И. Лобачевского, 603950 Н. Новгород, Россия

Поступила в редакцию 13 февраля 2024 г.

После переработки 19 февраля 2024 г.

Принята к публикации 1 марта 2024 г.

Теоретически изучен способ формирования контролируемой фазовой неоднородности в гибридной структуре, состоящей из короткого джозефсоновского контакта на стыке двух тонких сверхпроводящих пленок, один из электродов которого частично покрыт ферромагнитным изолятором. Совместное действие спинового расщепления и спин-орбитального взаимодействия Рашбы на границе сверхпроводника и ферромагнетика приводит к генерации спонтанного сверхтока, изменяющего транспортные свойства контакта. Выполнены расчеты критического тока и ток-фазовой зависимости такой гибридной структуры и показана возможность создания на ее основе аномального джозефсоновского  $\varphi_0$ -контакта с плавным изменением фазового сдвига  $\varphi_0$  в широких пределах.

DOI: 10.31857/S1234567824070061, EDN: PZNNXR

В последнее время растет интерес к изучению мезоскопических систем, в которых одновременно присутствуют сверхпроводимость, спин-орбитальное взаимодействие и магнетизм. Подобные сверхпроводящие структуры, у которых нарушена симметрия относительно обращения времени и пространственной инверсии [1], демонстрируют два интересных и взаимосвязанных поведения: аномальный эффект Джозефсона (см. обзор [2] и литературу в нем) и сверхпроводящий (СП) диодный эффект [3]. В первом случае речь идет о джозефсоновских  $\varphi_0$ -переходах с произвольным значением разности фаз  $\varphi_0$  в основном состоянии, ток-фазовое соотношение для которых имеет вид  $I(\varphi) = I_c \sin(\varphi + \varphi_0)$  [4, 5]. Здесь  $\varphi$  – разность фаз между СП электродами, а  $|I_c|$  – максимальный (критический) сверхток, который может протекать через переход [6, 7]. В частном случае  $\varphi_0 = \pi$  формируется  $\pi$ -контакт [8–11], которому формально соответствует отрицательное значение критического тока  $I_c < 0$  (см. обзор [12] и литературу в нем). Аномальный эффект Джозефсона может быть реализован между сверхпроводниками с необычным типом спаривания [13–15], в структурах, состоящих из чередующихся  $0$  и  $\pi$  минипереходов [4, 16–18], в контактах из обычных синглетных

сверхпроводников с барьером из магнитного металла без центра инверсии [5, 19, 20], а также в целом ряде других систем, включающих в себя квантовые точки [21] и полупроводниковые нанопроволоки с сильным спин-орбитальным взаимодействием [22], или топологические изоляторы [23, 24]. Помещенный в замкнутый контур, такой  $\varphi_0$ -контакт индуцирует аномальный джозефсоновский ток и может использоваться в качестве фазовой батареи [22, 25] или для управления СП цепями и запоминающими устройствами [26–28]. Сверхпроводящий диодный эффект подразумевает невзаимный (в более общем случае – анизотропный) транспорт, который возможен как в объемных материалах [29–31], так и в различного рода СП системах [32, 33], в том числе на основе джозефсоновских контактов [34, 35].

Описанные выше способы формирования  $\varphi_0$ -контакта используют различные механизмы формирования разности фаз, возникающие из-за особенностей туннелирования через барьер и/или симметрии сверхпроводящей волновой функции. Альтернативный подход заключается в создании фазового сдвига на переходе при помощи внешнего магнитного потока, пронизывающего нормальную область [18, 36, 37], или инъекции тока в область контакта на масштабе, меньшем характерной джозефсоновской длины [38–40]. Источниками сильной фазовой неоднородности в области перехода могут служить вихри Абрикосова, захваченные в

<sup>1)</sup>См. дополнительный материал к данной статье на сайте нашего журнала [www.jetpletters.ac.ru](http://www.jetpletters.ac.ru)

<sup>2)</sup>e-mail: samokh@ipmras.ru

электродах контакта [41–44]. Положением вихрей Абрикосова в контактах можно управлять, создавая дополнительный потенциал пиннинга при помощи микроструктурирования СП электродов [45] или формируя у поверхности сверхпроводника массив субмикронных ферромагнитных частиц [46–48], намагниченность которых может быть изменена зондом магнитосилового микроскопа [49]. Изменение положения вихрей относительно контакта ведет к существенному изменению полевой зависимости  $I_c(H)$  [45], транспортных свойств и ток-фазовой зависимости джозефсоновского контакта, и может сопровождаться формированием  $\pi$ -состояния в такой гибридной системе [50].

В данной работе изучены свойства гибридной структуры сверхпроводник–ферромагнетик (СФ) со свойствами перестраиваемого  $\varphi_0$ -контакта, которая состоит из планарного (торцевого) джозефсоновского перехода, один из СП электродов которого частично покрыт ферромагнитным изолятором (ФИ), магнитный момент которого лежит в плоскости пленки  $(x, y)$  (рис. 1). Обменное взаимодействие между

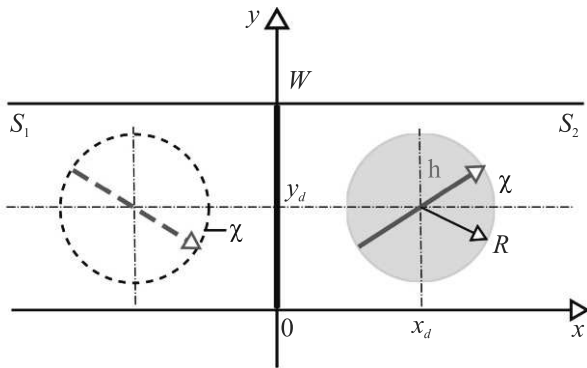


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схематичное изображение модельной СФ структуры: торцевой джозефсоновский переход в плоскости  $x = 0$  и однородно намагниченный ФИ диск радиуса  $R$  с центром в точке  $(x_d, y_d)$ . Пунктиром показано “изображение” ФИ диска, добавление которого обеспечивает отсутствие нормальной  $x$ -компоненты сверхтока в плоскости контакта и выполнение граничного условия (5)

ферромагнитно-упорядоченными ионами ФИ и электронами проводимости металла создает эффективное обменное поле  $\mathbf{h}$ , которое вызывает заметное расщепление спиновых подзон [51–54] (см., также обзоры [55, 56]). Из-за нарушенной симметрии относительно пространственной инверсии, в поверхностном слое толщиной  $l_{SO} \sim \hbar/\sqrt{2mE_g} \ll d$  вблизи СФ границы ( $-l_{SO} \leq z \leq 0$ ) присутствует СО взаимодействие Рашбы  $(\alpha_R/\hbar)[\mathbf{n} \times \mathbf{p}] \cdot \sigma$  [57, 58]. Здесь  $\mathbf{p}$  –

импульс электрона,  $\sigma$  – вектор матриц Паули,  $\mathbf{n}$  – единичный вектор в направлении нормали к СФ поверхности,  $E_g$  – типичная величина запрещенной зоны в ФИ, а  $\alpha_R = \hbar v_R$  – константа СО связи, зависящая от скорости Рашбы  $v_R$  [59]. Совместное действие обменного поля, СО взаимодействия и сверхпроводящего спаривания приводит к формированию в сверхпроводнике спирального (геликоидального) состояния [60], которое характеризуется модуляцией фазы сверхпроводящего параметра порядка  $\psi$  в направлении  $[\mathbf{n} \times \mathbf{h}]$  и оказывается бестоковым в пространственно однородных системах [57, 58, 60, 61]. Если сверхпроводник покрыт ферромагнетиком частично, то геликоидальное состояние формируется только в ограниченной области, что приводит к генерации сверхтока в гибридной структуре [62–65]. Сформированная таким образом фазовая неоднородность, которая играет роль фазовой батареи [66, 67], и создаваемый ею сверхток позволяют эффективно изменять ток-фазовую зависимость гибридной структуры в целом.

В качестве модельного объекта рассмотрим СФ-структуру, состоящую из джозефсоновского перехода на стыке двух пленок  $S_1$  и  $S_2$  сверхпроводника  $s$ -типа толщиной  $d$  ( $\lambda_F \ll d \ll \xi$ ) и шириной  $W \ll \Lambda$ , которые разделены тонким слоем изолирующего барьера (рис. 1). На поверхности электрода  $S_2$  торцевого контакта расположен ФИ диск с центром в  $\mathbf{r}_d = (x_d, y_d)$  и радиусом  $\xi \ll R \lesssim W/2$ . Здесь  $\xi$  – длина когерентности,  $\lambda_F$  – фермиевская длина волны сверхпроводящего металла в нормальном состоянии, а  $\Lambda = \lambda^2/d$  – пирловская глубина экранировки магнитного поля в пленке [68], зависящая от лондоновской глубины  $\lambda = (m c^2/4 \pi c^2 n_s)^{1/2}$  для массивного сверхпроводника. При  $d \ll \xi$  обменное взаимодействие в СП пленке под диском ( $|\mathbf{r} - \mathbf{r}_d| \leq R$ ) можно считать пространственно однородным. Полагая, что ФИ индуцирует в поверхностном слое толщиной  $a$  обменное поле  $h_{FI}$ , можно оценить величину эффективной энергии обменного взаимодействия  $h \approx h_{FI}(a/d)$  [52–56]. Ограничиваясь в дальнейшем случае достаточно низких температур, не будем учитывать подавление сверхпроводящего параметра порядка  $\psi = |\psi| e^{i\phi(\mathbf{r})}$  из-за обратного эффекта близости на СФ границе, считая  $|\psi|$  и  $\Lambda$  в СП пленке всюду одинаковыми. Будем полагать также, что расстояние от перехода до диска не слишком мало ( $x_d - R \gg \xi$ ), а вихри Пирла [68], которые могут образоваться вблизи краев ФИ диска [65, 69–71], отсутствуют. При этих предположениях, в функционал свободной энергии рассматриваемой гибридной структуры следует добавить линейное по импульсу

слагаемое (инвариант Лифшица), которое для модели Лондонов можно записать в виде [64]

$$\mathcal{F}_L = \frac{\alpha_R l_{SO}}{E_F} |\psi|^2 \int d\mathbf{r} [\mathbf{h}(\mathbf{r}) \times \mathbf{n}] \left( \nabla\phi + \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{A} \right), \quad (1)$$

где  $\Phi_0 = \pi\hbar c/e$  – квант магнитного потока ( $e > 0$ ),  $E_F$  – энергия Ферми в сверхпроводящем металле, а  $\mathbf{r} = (x, y)$  – радиус-вектор в плоскости структуры. Заметим, что вклад  $\mathcal{F}_L$  в свободную энергию сверхпроводника с нарушенной вдоль направления  $\mathbf{n}$  симметрией относительно пространственной инверсии и в присутствии обменного или зеемановского поля  $\mathbf{h}$  можно обосновать, используя только симметричные соображения [72, 73].

Возникновение неоднородного геликоидального состояния в ограниченной области СП пленки под ФИ диском приводит к генерации спонтанного сверхтока, распределение которого в лондоновском приближении с учетом градиентного слагаемого (1) и джозефсоновского перехода в плоскости  $x = 0$  описывается выражением

$$\mathbf{g}(\mathbf{r}) = -\frac{c\Phi_0}{8\pi^2\Lambda} \left( \nabla\phi + \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{A} - v + \alpha(\mathbf{r}) \right), \quad (2)$$

где символом  $\nabla$  обозначен градиент в плоскости  $(x, y)$ . Параметр

$$\alpha(\mathbf{r}) = \alpha_0 [\mathbf{e}_h, \mathbf{z}_0], \quad \alpha_0 = \frac{4\pi l_{SO}}{d\lambda_R} \frac{\hbar}{E_F} \quad (3)$$

отличен от нуля в области, покрытой ФИ диском, и характеризует совместное действие обменного поля  $\mathbf{h} = h\mathbf{e}_h$  и СО взаимодействия Рашбы ( $\lambda_R = 2\pi\hbar/mv_R$  – длина волны, соответствующая импульсу Рашбы), а  $\mathbf{e}_h$  – единичный вектор в направлении обменного поля. Вихревой источник  $v$  определяется градиентом джозефсоновской разности фаз  $\partial_y\varphi(y)$  на переходе [74]

$$\nabla \times v = \partial_y\varphi \delta(x) \mathbf{z}_0, \quad \nabla \cdot v = 0. \quad (4)$$

Для простейшей синусоидальной зависимости джозефсоновского тока от разности фаз  $j = j_c \sin\varphi$ , нормальная по отношению к переходу компонента тока  $\mathbf{g}$  в плоскости перехода должна удовлетворять условию

$$g_x(0, y) = g_c \sin(\varphi(y)), \quad g_c = j_c d.$$

В торцевом переходе с критической плотностью тока  $j_c$  при  $d \ll \lambda$  роль джозефсоновской длины  $\lambda_J = (c\Phi_0/16\pi^2\lambda j_c)^{1/2}$  играет величина  $L = \lambda_J^2/\lambda = c\Phi_0/16\pi^2\Lambda g_c$  [75], и при  $W \ll \Lambda$ ,  $L$  вклад вихревого источника  $v$  (4) в сверток  $\mathbf{g}(\mathbf{r})$  (2) можно не учитывать [76]. Полагая критический ток контакта малым

по сравнению с токами, индуцированными в пленке ФИ диском, пренебрежем малой электронной прозрачностью изолирующего барьера и будем считать в дальнейшем  $j_c = 0$ . Это простейшее приближение соответствует нулевому граничному условию для компоненты сверхтока  $g_x(\mathbf{r})$  в электроде  $S_2$  контакта

$$g_x(0, y) = 0 \quad (5)$$

и допускает аналитическое решение, позволяющее качественно описать ожидаемый эффект. В рассматриваемом здесь случае узкой СП полоски ( $W \ll \Lambda$ ), “разорванной” джозефсоновским переходом, можно пренебречь эффектом экранировки и не учитывать влияние создаваемого этим током магнитного поля. При этом распределение тока  $\mathbf{g}(\mathbf{r})$  будет определяться преимущественно слагаемым  $\nabla\phi$  ( $\Phi_0 |\nabla\phi|/|\mathbf{A}| \sim \Lambda/W \gg 1$ ), а вкладом векторного потенциала  $\mathbf{A}$  в выражении (2) можно пренебречь. На краях СП полоски ( $y = 0, W$ )  $y$ -компонента сверхтока  $\mathbf{g}(\mathbf{r})$  (2) должна отсутствовать, что соответствует граничным условиям

$$g_y(x, 0) = g_y(x, W) = 0. \quad (6)$$

Условие  $\text{div} \mathbf{g}(\mathbf{r}) = 0$  вместе с выражением (2) и граничными условиями (5) и (6) позволяют рассчитать распределение СП параметра порядка и сверхтока, возбуждаемого в узкой СП полоске с торцевым джозефсоновским переходом под действием обменного поля ФИ диска и СО взаимодействия Рашбы на СФ интерфейсе.

Подставляя выражение для сверхтока (2) в условие  $\text{div} \mathbf{g}(\mathbf{r}) = 0$ , получим двумерное уравнение Пуассона

$$\Delta\phi(\mathbf{r}) = -\text{div} \alpha(\mathbf{r}), \quad (7)$$

которое вместе с граничными условиями (5), (6) описывает распределение фазы  $\phi(\mathbf{r})$  параметра порядка в электроде контакта  $S_2$  с ФИ диском, т.е. в данном случае при  $x \geq 0$  (см. рис. 1). При указанных приближениях – пренебрежение эффектами экранировки ( $\mathbf{A} = 0$ ) и отсутствие джозефсоновского тока через абсолютно непрозрачный барьер ( $j_c = 0$ ) – в левом контакте  $S_1$  сверхток отсутствует, и устанавливается однородное состояние с волновой функцией, фазу которой для определенности можно принять равной нулю. Для выполнения граничного условия (5) воспользуемся методом изображений и добавим сверхток, создаваемый ФИ диском с центром  $(-x_d, y_d)$ , радиусом  $R$  и обменным полем  $\tilde{\mathbf{h}} = h(\mathbf{x}_0 \cos\chi - \mathbf{y}_0 \sin\chi)$ . В силу линейности уравнения (7) и граничных условий (5), (6) представим искомое решение уравнения (7) при  $x \geq 0$  в виде

$$\phi(\mathbf{r}) = \phi_+^\alpha(\mathbf{r}) + \phi_-^\alpha(\mathbf{r}) + \psi(\mathbf{r}). \quad (8)$$

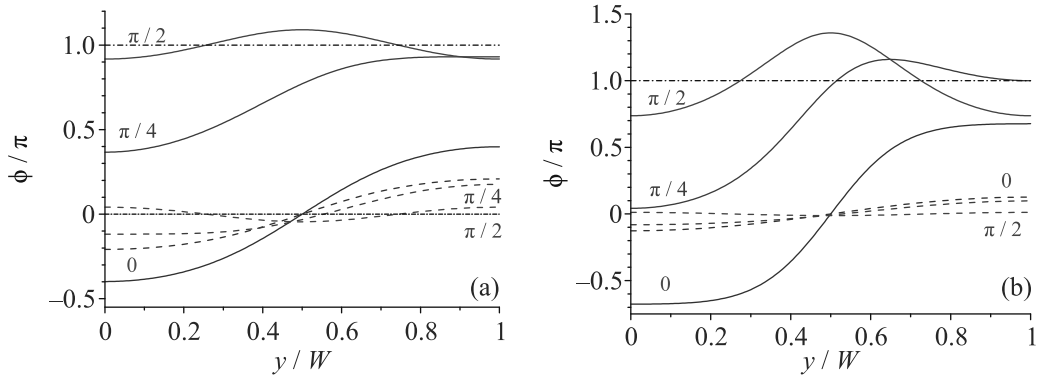


Рис. 2. (Цветной онлайн) Распределение фазы волновой функции  $\phi(x_s, y)$  (8), (9), (12) в двух поперечных сечениях электрода  $S_2$  ( $x_s = 0$  – сплошные линии;  $x_s = W$  – пунктирные линии) и для нескольких ориентаций обменного поля ФИ диска  $\chi = 0; \pi/4; \pi/2$ : (a) –  $x_d = 0.5W$ ; (b) –  $x_d = 0.3W$ . Расчеты выполнены для  $\alpha_0 R^2/W = 1$ ,  $R = 0.25W$ ,  $y_d = 0.5W$

Здесь  $\phi_{\pm}^{\alpha}(\mathbf{r})$  – решение уравнений Пуассона (7) в неограниченной пленке с ФИ диском, источники в правой части которых отличны от нуля в областях  $r_{\pm}^2 = (x \mp x_d)^2 + (y - y_d)^2 \leq R^2$  и характеризуются обменным полем  $\mathbf{h} = h(\mathbf{x}_0 \cos \chi \pm \mathbf{y}_0 \sin \chi)$ , соответственно (см. дополнительные материалы):

$$\phi_{\pm}^{\alpha}(\mathbf{r}) = \frac{\alpha_0}{2} [\mp(x \mp x_d) \sin \chi + (y - y_d) \cos \chi] \times \begin{cases} 1, & r_{\pm} < R \\ (R/r_{\pm})^2, & r_{\pm} > R \end{cases}. \quad (9)$$

Функция  $\psi(\mathbf{r})$  – это решение двумерного уравнения Лапласа

$$\Delta \psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (10)$$

в бесконечной полосе  $|x| < \infty$ ,  $0 \leq y \leq W$  с граничными условиями на краях  $y = 0$  и  $y = W$

$$\partial_y \psi \Big|_{y=0, W} = -\partial_y (\phi_+^{\alpha} + \phi_-^{\alpha}) \Big|_{y=0, W}, \quad (11)$$

которое можно записать в виде [77]:

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{\alpha_0 R^2}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} du [f_w(u) Q_w(\mathbf{r}, u) - f_d(u) Q_d(\mathbf{r}, u)],$$

$$Q_{d(w)}(\mathbf{r}, u) = \ln \left[ \cosh \left( \pi \frac{x - u}{W} \right) \mp \cos \left( \frac{\pi y}{W} \right) \right], \quad (12)$$

$$f_{d(w)}(u) = \frac{\cos \chi}{u_{d(w)+}^2} \mp \frac{2y_{d(w)} [(u - x_d) \sin \chi \pm y_{d(w)} \cos \chi]}{u_{d(w)+}^4} + \frac{\cos \chi}{u_{d(w)-}^2} \pm \frac{2y_{d(w)} [(u + x_d) \sin \chi \mp y_{d(w)} \cos \chi]}{u_{d(w)-}^4},$$

где  $y_w = W - y_d$ ,  $u_{d\pm}^2 = (u \mp x_d)^2 + y_d^2$  и  $u_{w\pm}^2 = (u \mp x_d)^2 + y_w^2$ .

Полученные таким образом выражения (8), (9) и (12) определяют распределение фазы параметра порядка  $\phi(x, y)$  в неоднородном состоянии, возникающем в узкой СП полоске с торцевым джозефсоновским переходом при  $x \geq 0$  под действием обменного поля ФИ диска и СО взаимодействия Рашбы на СФ интерфейсе. При этом фаза  $\phi(x, y)$  определена с точностью до произвольного значения  $\varphi_0$ , которое фиксирует разность фаз параметров порядка в электродах  $S_1$  и  $S_2$  далеко от области перехода и ФИ диска, где устанавливается однородное СП состояние. На рисунке 2 показаны распределения фазы  $\phi(x, y)$  для двух поперечных сечений электрода  $S_2$  при разных ориентациях обменного поля ФИ диска. Из рисунка 2 видно, что в поперечном сечении  $x = x_s$  справа от диска распределение фазы  $\phi(x_s, y)$  (пунктирные линии) становится практически однородным уже при  $x_s - x_d \gtrsim R$ . Создаваемое ФИ диском неоднородное распределение фазы  $\phi(0, y)$  в плоскости перехода (сплошные линии) существенно зависит от ориентации обменного поля  $\mathbf{h}$  и расположения ФИ диска. Амплитуда модуляции фазы  $\phi(0, y)$ , как и следовало ожидать, растет с уменьшением расстояния  $x_d - R$  между диском и переходом.

Ограничимся в дальнейшем случае, когда центр ФИ диска расположен симметрично относительно краев СП полоски, т.е. положим  $y_d = W/2$ . Поскольку очевидным пространственным масштабом в рассматриваемой структуре является ширина СП электродов  $W$ , то перейдем к безразмерным переменным, измеряя все расстояния в единицах  $W$ . Тогда  $y_w = y_d$ ,  $u_{w\pm} = u_{d\pm}$ , выражение для  $\psi_0(y) = \psi(0, y)$  (12) упрощается и может быть записано в виде:

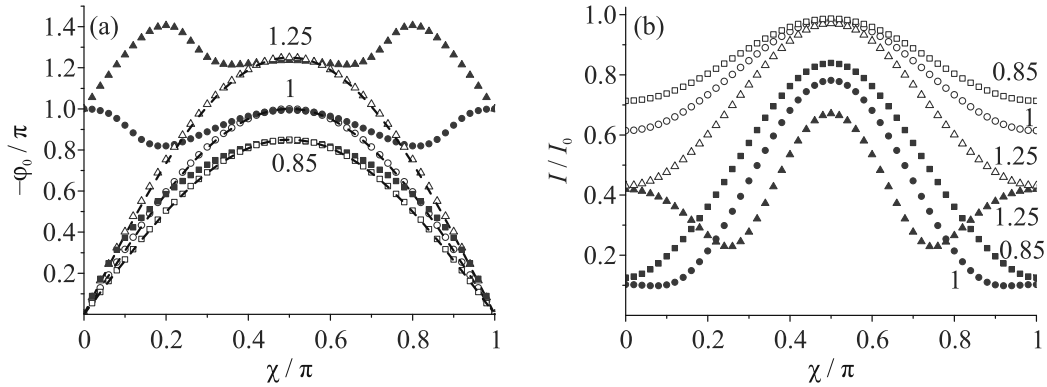


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимости: (а) – фазового сдвига  $\varphi_0$  и (б) – критического тока  $I_c$  от направления обменного поля  $\chi$  для трех значений параметра  $\alpha_0 R^2/W = 0.85; 1; 1.25$  и двух расстояний от центра ФИ диска до перехода  $x_d = 0.3W$  (заполненные символы) и  $x_d = 0.5W$  (незаполненные символы). Расчеты выполнены для  $R = 0.25W$ ,  $y_d = 0.5W$ . Пунктирными линиями на панели (а) показана зависимость (16)

$$\psi_0(y) = \frac{\alpha_0 R^2}{4\pi W} \times \left\{ \cos \chi \int_{-\infty}^{+\infty} du A(u) [Q_w(0, y, u) - Q_d(0, y, u)] + \sin \chi \int_{-\infty}^{+\infty} du B(u) [Q_d(0, y, u) + Q_w(0, y, u)] \right\}, \quad (13)$$

$$A(u) = \frac{(u - x_d)^2 - y_d^2}{[(u - x_d)^2 + y_d^2]^2} + \frac{(u + x_d)^2 - y_d^2}{[(u + x_d)^2 + y_d^2]^2},$$

$$B(u) = \left[ \frac{2y_d(u - x_d)}{[(u - x_d)^2 + y_d^2]^2} - \frac{2y_d(u + x_d)}{[(u + x_d)^2 + y_d^2]^2} \right].$$

В предельном случае малой прозрачности изолирующего барьера ( $j_c \rightarrow 0$ ), найденное распределение фазы параметра порядка  $\phi(x, y) + \varphi_0$  в электроде  $S_2$  определяет джозефсоновскую разность фаз  $\varphi(y) + \varphi_0 = \phi(0, y) + \varphi_0$  на торцевом контакте, где

$$\varphi(y) = \frac{\alpha_0 R^2}{W} \frac{x_d \sin \chi + (y - y_d) \cos \chi}{x_d^2 + (y - y_d)^2} + \psi_0(y). \quad (14)$$

Амплитуда модуляции джозефсоновской разности фаз (14) зависит от безразмерного параметра  $\alpha_0 R^2/W$ , который описывает совокупное влияние спонтанного сверхтока (2) на торцевой переход.

Для постоянной величины  $j_c$  и синусоидальной зависимости плотности сверхтока через контакт от разности фаз, основное состояние джозефсоновского перехода в рассматриваемой гибридной структуре соответствует минимуму энергии

$$E_J(\varphi_0) = \frac{\hbar I_0}{2e} \left[ 1 - \int_0^1 dy \cos[\varphi(y) + \varphi_0] \right], \quad (15)$$

где  $I_0 = j_c dW$  – максимальный сверхток торцевого контакта, выражение  $\varphi(y)$  (14) определяет модуляцию разности фаз на переходе, а  $\varphi_0$  – разность фаз параметров порядка в сечениях электродов  $S_1$  и  $S_2$  далеко от области перехода и ФИ диска, где устанавливается однородное по пространственным координатам СП состояние. Минимум энергии (15) определяет фазовый сдвиг  $\varphi_0 = -\arctan(S_\varphi/C_\varphi)$  в ток-фазовом соотношении  $I(\varphi) = I_c \sin(\varphi + \varphi_0)$ , где  $I_c = I_0 \sqrt{S_\varphi^2 + C_\varphi^2}$  – критический ток  $\varphi_0$ -контакта, а

$$S_\varphi = \int_0^1 dy \sin(\varphi(y)), \quad C_\varphi = \int_0^1 dy \cos(\varphi(y)).$$

На рисунке 3 приведены зависимости фазового сдвига  $\varphi_0$  и критического тока  $I_c$  от ориентации обменного поля ФИ диска для нескольких значений параметра  $\alpha_0 R^2/W$ , которые показывают возможность создания на основе такой гибридной СФ структуры аномального джозефсоновского контакта с плавным изменением фазового сдвига  $\varphi_0$  в широких пределах (от  $\varphi_0 = 0$  до  $\varphi_0 = \pi$ ). Гибридный  $\varphi_0$ -контакт состоит из торцевого джозефсоновского перехода и внешней фазовой батареи, которая обеспечивает плавную регулировку как фазового сдвига  $\varphi_0$ , так и критического тока  $I_c$  структуры в целом. Если расстояние между диском и переходом не слишком мало ( $x_d > 2R$ ), а параметр  $\alpha_0 R^2/W \lesssim 1$ , то модуляция джозефсоновской разности фаз оказывается слабой  $|\varphi(y) + \varphi_0| \ll \pi$ , критический ток  $I_c$  незначительно уменьшается по сравнению со своим максимальным значением  $I_0$ , и фазовый сдвиг  $\varphi_0$  можно оценить следующим образом (см. дополнительный материал):



$$\varphi_0 \approx - \int_0^1 dy \varphi(y) = - \frac{\pi \alpha_0 R^2}{W} \sin \chi. \quad (16)$$

Полученная простая оценка  $\varphi_0$  (16) хорошо согласуется с результатами вычислений (см. пунктирные линии на рис. 3а). Подчеркнем, что разность фаз  $\varphi$  и фазовый сдвиг  $\varphi_0$  определены между достаточно удаленными от области перехода и ФИ диска сечениями электродов, где восстанавливается однородное СП состояние, т.е. в состав гибридной джозефсоновской структуры входят сам туннельный контакт и та часть электрода  $S_2$ , где пространственное распределение транспортного тока отклоняется от равномерного. Создаваемый ФИ диском и СО взаимодействием спонтанный сверхток изменяют кинетическую индуктивность электрода, формируя дополнительный набег разности фаз  $\varphi_0$ . Подобная модификация ток-фазового соотношения  $I(\varphi)$  в джозефсоновских  $SNS$  структурах, учитывающая индуктивность из-за перераспределения сверхтока в электродах, рассматривалась в работах [78, 79].

Таким образом, в работе изучены свойства гибридного  $\varphi_0$ -контакта, состоящего из торцевого джозефсоновского перехода и внешней фазовой батареи, формируемой ФИ диском на поверхности одного из СП электродов контакта в присутствии спин-орбитального взаимодействия типа Рашбы на границе сверхпроводника и ферромагнетика. Важным отличием такого устройства является возможность плавно и в широком диапазоне (от 0 до  $\pi$ ) регулировать фазовый сдвиг  $\varphi_0$  в ток-фазовом соотношении  $I(\varphi) = I_c \sin(\varphi + \varphi_0)$ , изменяя направление вектора намагниченности в слое ФИ и сохраняя при этом практически неизменной величину критического тока  $I_c$ .

Автор благодарит А. С. Мельникова и А. И. Буздина за полезные обсуждения.

**Финансирование работы.** Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант # 20-12-00053).

**Конфликт интересов.** Автор декларирует отсутствие конфликта интересов.

1. K. V. Samokhin, *Ann. Phys.* **324**, 2385 (2009).
2. Ю. М. Шукринов, *УФН* **192**, 345 (2022) [*Yu. M. Shukrinov, Phys.-Uspekhi* **65**, 317 (2022)].
3. M. Nadeem, M. S. Fuhrer, and X Wang, *Nat. Rev. Phys.* **5**, 558 (2023).
4. A. Buzdin and A. E. Koshelev, *Phys. Rev. B* **67**, 220504 (2003).
5. A. Buzdin, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 107005 (2008).
6. K. K. Likharev, *Rev. Mod. Phys.* **51**, 101 (1979).

7. A. A. Golubov, M. Y. Kupriyanov, and E. Il'ichev, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 411 (2004).
8. Л. Н. Булаевский, В. В. Кузий, А. А. Собынин, *Письма в ЖЭТФ* **25**, 314 (1977) [*JETP Lett.* **25**, 290 (1977)].
9. A. I. Buzdin, L. N. Bulaevskii, and S. V. Panyukov, *Pis'ma ZhETF* **35**, 147 (1982) [*JETP Lett.* **35**, 178 (1982)].
10. А. И. Буздин, М. Ю. Куприянов, *Письма в ЖЭТФ* **53**, 308 (1991).
11. V. V. Ryazanov, V. Oboznov, A. Rusanov, A. Veretennikov, A. Golubov, and J. Aarts, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2427 (2001).
12. A. I. Buzdin, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 935 (2005).
13. V. B. Geshkenbein and A. I. Larkin, *Pis'ma ZhETF* **43**, 306 (1986) [*JETP Lett.* **43**, 395 (1986)].
14. S. K. Yip, *Phys. Rev. B* **52**, 3087 (1995).
15. Y. Tanaka and S. Kashiwaya, *Phys. Rev. B* **56**, 892 (1997).
16. E. Goldobin, D. Koelle, R. Kleiner, and A. Buzdin, *Phys. Rev. B* **76**, 224523 (2007).
17. H. Sickinger, A. Lipman, M. Weides, R. G. Mints, H. Kohlstedt, D. Koelle, R. Kleiner, and E. Goldobin, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 107002 (2012).
18. I. I. Soloviev, N. V. Klenov, S. V. Bakurskii, V. V. Bol'ginov, V. V. Ryazanov, M. Yu. Kupriyanov, and A. A. Golubov. *Appl. Phys. Lett.* **105**, 242601 (2014).
19. F. Konschelle, I. V. Tokatly, and F. S. Bergeret, *Phys. Rev. B* **92**, 125445 (2015).
20. M. A. Silaev, I. V. Tokatly, and F. S. Bergeret, *Phys. Rev. B* **95**, 184508 (2017).
21. D. B. Szombati, S. Nadj-Perge, D. Car, S. R. Plissard, E. P. A. M. Bakkers, and L. P. Kouwenhoven, *Nat. Phys.* **12**, 586 (2016).
22. E. Strambini, A. Iorio, O. Durante, R. Citro, C. Sanz-Fernandez, C. Guarcello, I. V. Tokatly, A. Braggio, M. Rocci, N. Ligato, V. Zannier, L. Sorba, F. S. Bergeret, and F. A. Giazotto, *Nature Nanotech.* **15**, 656 (2020).
23. A. Assouline, C. Feuillet-Palma, N. Bergeal, T. Zhang, A. Mottaghizadeh, A. Zimmers, E. Lhuillier, M. Eddrie, P. Atkinson, M. Aprili, and H. Aubin, *Nat. Commun.* **10**, 126 (2019).
24. W. Mayer, M. C. Dartiailh, J. Yuan, K. S. Wickramasinghe, E. Rossi, and J. Shabani, *Nat. Commun.* **11**, 212 (2020).
25. S. Pal, C. Benjamin, *EPL* **126**, 57002 (2019).
26. A. K. Feofanov, V. A. Oboznov, V. V. Bol'ginov, J. Lisenfeld, S. Poletto, V. V. Ryazanov, A. N. Rossolenko, M. Khabipov, D. Balashov, A. B. Zorin, P. N. Dmitriev, V. P. Koshelets, and A. V. Ustinov, *Nature Phys.* **6**, 593 (2010).

27. E. Goldobin, H. Sickinger, M. Weides, N. Ruppelt, H. Kohlstedt, R. Kleiner, and D. Koelle, *Appl. Phys. Lett.* **102**, 242602 (2013).
28. I. I. Soloviev, N. V. Klenov, S. V. Bakurskiy, M. Y. Kupriyanov, A. L. Gudkov, and A. S. Sidorenko, *Beilstein J. Nanotechnol.* **8**, 2689 (2017).
29. R. Wakatsuki, Y. Saito, S. Hoshino, Y. M. Itahashi, T. Ideue, M. Ezawa, Y. Iwasa, and N. Nagaosa, *Sci. Adv.* **3**, e1602390 (2017).
30. A. Daido, *Phys. Rev. Lett.* **128**, 037001 (2022).
31. J. J. He, Y. Tanaka, and N. Nagaosa, *New J. Phys.* **24**, 053014 (2022).
32. T. Karabassov, I. V. Bobkova, A. A. Golubov, and A. S. Vasenko, *Phys. Rev. B.* **106**, 224509 (2022).
33. A. V. Putilov, S. V. Mironov, and A. I. Buzdin, *Phys. Rev. B.* **109**, 014510 (2024).
34. C. Baumgartner, L. Fuchs, A. Costa, S. Reinhardt, S. Gronin, G. C. Gardner, T. Lindemann, M. J. Manfra, P. E. Faria J., D. Kochan, J. Fabian, N. Paradiso, and C. Strunk, *Nature Nanotech.* **17**, 39 (2022).
35. Ya. V. Fominov and D. S. Mikhailov, *Phys. Rev. B.* **106**, 134514 (2022).
36. M. Alidoust and J. Linder, *Phys. Rev. B* **87**, 060503 (2013).
37. И. И. Соловьев, Н. В. Кленов, С. В. Бакурский, М. Ю. Куприянов, А. А. Голубов, *Письма в ЖЭТФ* **101**, 258 (2015).
38. A. V. Ustinov, *Appl. Phys. Lett.* **80**, 3153 (2002).
39. E. Goldobin, A. Sterck, T. Gaber, D. Koelle, and R. Kleiner, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 057005 (2004).
40. E. Goldobin, S. Mironov, A. Buzdin, R. G. Mints, D. Koelle, and R. Kleiner, *Phys. Rev. B* **93**, 134514 (2016).
41. S. L. Miller, K. R. Biaga, J. R. Clem, and D. K. Finnemore, *Phys. Rev. B* **31**, 2684 (1985).
42. А. А. Голубов, М. Ю. Куприянов, *ЖЭТФ* **92**, 1512 (1987).
43. М. В. Фистуль, *Письма в ЖЭТФ* **52**, 823 (1990).
44. T. Golod, A. Rydh, and V. M. Krasnov, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 227003 (2010).
45. T. Golod, R. A. Novhannisyanyan, O. M. Kapran, V. V. Dremov, V. S. Stolyarov, V. M. Krasnov, *Nano Lett.* **21**, 5240 (2021).
46. A. A. Fraerman, S. A. Gusev, Y. N. Nozdrin, A. V. Samokhvalov, S. N. Vdovichev, L. Fritzsche, E. Il'ichev, and R. Stolz, *Phys. Rev. B* **73**, 100503 (2006).
47. А. В. Самохвалов, *ЖЭТФ* **131**, 500 (2007).
48. А. В. Самохвалов, С. Н. Вдовичев, Б. А. Грибков, С. А. Гусев, А. Ю. Климов, Ю. Н. Ноздрин, В. В. Рогов, А. А. Фраерман, С. В. Егоров, В. В. Больгинов, А. Б. Шкарин, В. С. Столяров, *Письма в ЖЭТФ* **95**, 113 (2012).
49. J. Chang, V. L. Mironov, B. A. Gribkov, A. A. Fraerman, S. A. Gusev, and S. N. Vdovichev, *J. Appl. Phys.* **100**, 104304 (2006).
50. A. V. Samokhvalov, *Phys. Rev. B* **80**, 134513 (2009).
51. P. M. Tedrow, J. E. Tkaczyk, and A. Kumar, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 1746 (1986).
52. T. Tokuyasu, J. A. Sauls, and D. Rainer, *Phys. Rev. B* **38**, 8823 (1988).
53. A. Hijano, S. Ili'c, M. Rouco, C. Gonzalez-Orellana, M. Ilyn, C. Rogero, P. Virtanen, T. T. Heikkila, S. Khorshidian, M. Spies, N. Ligato, F. Giazotto, E. Strambini, and F. S. Bergeret, *Phys. Rev. Research* **3**, 023131 (2021).
54. А. А. Копасов and А. С. Мел'ников, *Phys. Rev. B* **105**, 214508 (2022).
55. I. V. Bobkova, A. M. Bobkov, and M. A. Silaev, *J. Phys. Cond. Matt.* **34**, 353001 (2022).
56. T. T. Heikkila, M. Silaev, P. Virtanen, and F. S. Bergeret, *Prog. Surf. Sci.* **94**, 100540 (2019).
57. L. P. Gor'kov and E. I. Rashba, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 037004 (2001).
58. V. M. Edelstein, *Phys. Rev. B* **67**, 020505 (2003).
59. Е. И. Рашба, *ФТТ* **2**(6), 1224 (1960).
60. В. М. Эдельштейн, *ЖЭТФ* **95**, 2151 (1989).
61. V. M. Edelstein, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 2004 (1995).
62. S. S. Pershoguba, K. Björnson, A. M. Black-Schaffer, and A. V. Balatsky, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 116602 (2015).
63. A. G. Mal'shukov *Phys. Rev. B* **93**, 054511 (2016).
64. J. Baumard, J. Cayssol, F. S. Bergeret, and A. Buzdin, *Phys. Rev. B* **99**, 014511 (2019).
65. А. В. Самохвалов, *ЖЭТФ* **162**, 941 (2022).
66. J. W. A. Robinson, A. V. Samokhvalov, and A. I. Buzdin, *Phys. Rev. B* **99**, 180501(R) (2019).
67. А. В. Самохвалов, А. А. Копасов, А. Г. Кутлин, С. В. Миронов, А. И. Буздин, А. С. Мельников, *Письма в ЖЭТФ* **113**, 38 (2021).
68. J. Pearl, *Appl. Phys. Lett.* **5**, 65 (1964).
69. L. A. B. Olde Olthof, X. Montiel, J. W. A. Robinson, A. I. Buzdin, *Phys. Rev. B* **100**, 220505(R) (2019).
70. A. G. Mal'shukov, *Phys. Rev. B* **101**, 134514 (2020).
71. A. G. Mal'shukov, *Phys. Rev. B* **102**, 144503 (2020).
72. В. П. Минеев, К. В. Самохин, *ЖЭТФ* **105**, 747 (1994) [*Sov. Phys. JETP* **78**, 401 (1994)].
73. D. F. Agterberg, *Physica C* **387**, 13 (2003).
74. Ю. М. Иванченко, Т. К. Соболева, *ФТТ* **32**, 2029 (1990).
75. V. G. Kogan, V. V. Dobrovitski, J. R. Clem, Y. Mawatari, and R. G. Mints, *Phys. Rev. B* **63**, 144501 (2001).

76. M. Moshe, V. G. Kogan, and R. G. Mints, Phys. Rev. B **78** 020510(R) (2008).
77. А. Д. Полянин, *Справочник по линейным уравнениям математической физики*, ФИЗМАТЛИТ, М. (2001).
78. А. А. Зубков, М. Ю. Куприянов, В. К. Семенов, ФНТ **7**, 1365 (1981).
79. V. Ruzhickiy, S. Bakurskiy, M. Kupriyanov, N. Klenov, I. Soloviev, V. Stolyarov, and A. Golubov, Nanomaterials **13**, 1873 (2023).

# Raman spectroscopy of $\text{Na}_3\text{Co}_2\text{SbO}_6$

Yu. S. Ponosov<sup>a</sup>, E. V. Komleva<sup>a,b</sup>, E. A. Pankrushina<sup>c,b</sup>, D. Mikhailova<sup>d</sup>, S. V. Streltsov<sup>a,b1)</sup>

<sup>a</sup>*Institute of Metal Physics, 620108 Ekaterinburg, Russia*

<sup>b</sup>*Ural Federal University, 620002 Ekaterinburg, Russia*

<sup>c</sup>*A. N. Zavaritsky Institute of Geology and Geochemistry, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, 620016 Ekaterinburg, Russia*

<sup>d</sup>*Institute for Complex Materials, Leibniz Institute for Solid State and Materials Research (IFW) Dresden, 01069 Dresden, Germany*

Submitted 16 January 2024

Resubmitted 19 February 2024

Accepted 2 March 2024

DOI: 10.31857/S1234567824070073, EDN: QCHZOW

Materials, in which competition of a bond-directional exchange interaction leading to a strong frustration presented, can be a physical realization of the Kitaev model described by the Hamiltonian

$$H = \sum_{\langle ij \rangle_\gamma} K^\gamma \hat{S}_i^\gamma \hat{S}_j^\gamma, \quad (1)$$

where different spin components  $\gamma = \{x, y, z\}$  for three symmetry inequivalent nearest neighbours (numerated by site indexes  $i$  and  $j$ ) on the honeycomb lattice turn out to be coupled by the exchange constants  $K^\gamma$  [1]. Such materials are under active investigation nowadays [2–4]. An efficient method of studying such Kitaev materials is the Raman spectroscopy.

In the paper we for the first time present the results of Raman measurements in a wide frequency range for one of the honeycomb cobaltites  $\text{Na}_3\text{Co}_2\text{SbO}_6$  considered as possible candidates for Kitaev physics as well as the density functional theory (DFT) lattice dynamics simulations for the compound.

Co, forming here a layered honeycomb structure, is  $2+$  with electronic configuration  $3d^7$  and spin  $S = 3/2$ . The magnetic ground state corresponds to a so-called antiferromagnetic (AFM) zigzag structure, when ferromagnetic (FM) spins are ordered in zigzag fashion [5]. Effective magnetic moment is  $5.2 - 5.5\mu_B$  [5–7], suggesting substantial contribution of the orbital moment.

Although  $\text{Na}_3\text{Co}_2\text{SbO}_6$  orders magnetically it was recently shown that a moderate magnetic field of 1–2 T suppresses the long-range magnetic order and leads to a field-induced state, which can retain some features of Kitaev physics [8].

Polarized Raman measurements in the temperature range of 80 to 300 K were performed in backscattering

geometry from the polycrystalline sample [8] using an RM1000 Renishaw microspectrometer.

DFT +  $U$  calculations ([9],  $U = 7$  eV,  $J_H = 1$  eV, [10, 11]) have been performed using VASP [12] within generalized gradient approximation (GGA) [13]. Phonon frequencies at  $\Gamma$ -point were computed using the density functional perturbation theory (DFPT) [14, 15].

$\text{Na}_3\text{Co}_2\text{SbO}_6$  crystallizes in a monoclinic structure (space group  $C2/m$ ) [5], which implies  $7A_g$  and  $8B_g$  phonons, that theoretically can be observed with Raman spectroscopy. The measured room temperature spectra show 11 lines at frequencies 121, 159, 207, 292, 371, 444, 495, 528, 543, 618, and 636  $\text{cm}^{-1}$  (see Fig. 1). The exact shape of phonon lines is difficult to determine due to their large width and the overlap of some lines with others for the power sample.

As the temperature decreases, most of the lines narrow only slightly; the accompanying hardening suggests the influence of anharmonic contributions. The new narrow peak appears below 200 K at 525  $\text{cm}^{-1}$  (see the insert in Fig. 1a). As there is no information about structural transitions at this temperature in  $\text{Na}_3\text{Co}_2\text{SbO}_6$ , it can be a sign of either two-magnon scattering or a gradual development of the short-range correlations with decreasing temperature.

In the high-frequency region, the spectra show broad bands at 1060, 1570 and possibly 2080  $\text{cm}^{-1}$  given in the insert in Fig. 1b. Such extra peaks are typical for some other honeycomb lattice layered compounds and associated with high-order phonon scattering.

It turned out that taking into account spin degrees of freedom in DFT +  $U$  calculations strongly affects the resulting phonons frequencies and hence, their agreement with the experimental ones. It can be regarded as a proof of the sensitivity of the phonons to magnetic

<sup>1)</sup>e-mail: streltsov@imp.uran.ru

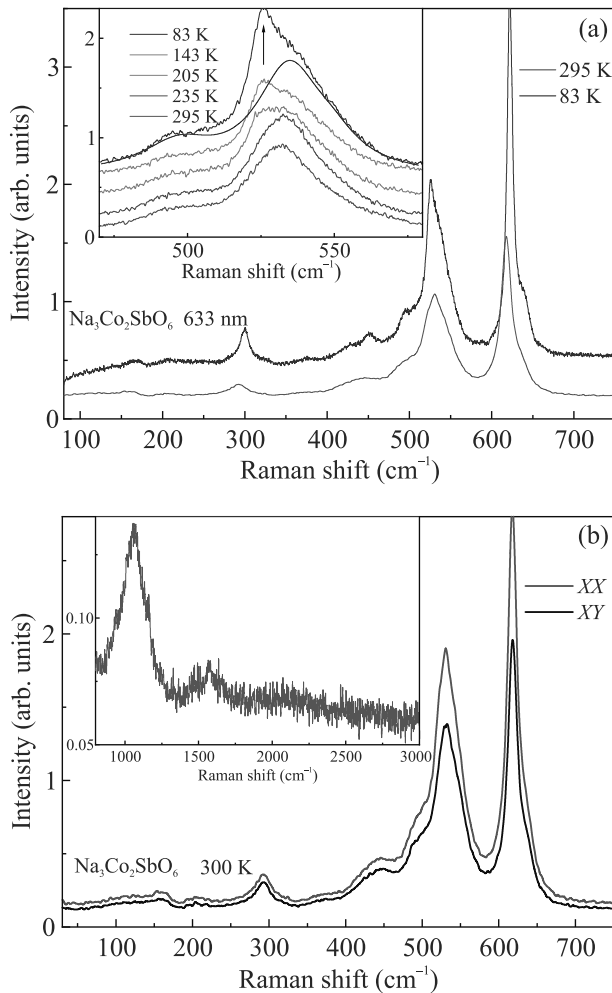


Fig. 1. (Color online) (a) – Raman spectra of  $\text{Na}_3\text{Co}_2\text{SbO}_6$  measured at 83 and 295 K. Insert shows temperature evolution of the spectral range where line near  $525\text{ cm}^{-1}$  appears. (b) – Raman spectra of  $\text{Na}_3\text{Co}_2\text{SbO}_6$  measured in  $XX$  and  $XY$  scattering geometries at 300 K. High-frequency spectral range containing two-phonon excitation is shown in insert

order in the compound and highlights the importance of the spin-lattice coupling in  $\text{Na}_3\text{Co}_2\text{SbO}_6$ .

Considering of the spin-orbit coupling (SOC) also slightly modifies the calculated phonon spectrum and further improves agreement with the experiment, especially for the highest-frequency modes.

The effect of both magnetism and SOC is mostly observed for the highest phonon modes. According to the results of our calculations the two highest modes correspond to stretching distortions of  $\text{SbO}_6$  octahedra, which are in the centers of Co hexagons. In case of AFM zigzag order magnetostriction leads to decrease of Sb-Co distances. This explains frequency growth and, hence, hardening of the stretching mode.

Finally, the Raman spectra do not reveal formation of high-energy continuum observed in some Kitaev materials [16, 17].

We are extremely grateful to T. Vasilchikova for help with samples and to P. Maksimov, and E. Vavilova for various stimulating discussions on  $\text{Na}_3\text{Co}_2\text{SbO}_6$ .

**Funding.** This work was supported by the Russian Science Foundation via project RSF 23-12-00159.

**Conflict of interest.** The authors have no conflicts of interest to declare.

This is an excerpt of the article “Raman spectroscopy of  $\text{Na}_3\text{Co}_2\text{SbO}_6$ ”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364024600125

1. A. Kitaev, *Ann. Phys. (Amsterdam, Neth.)* **321**, 2 (2006).
2. H. Takagi, T. Takayama, G. Jackeli, G. Khaliullin, and S. E. Nagler, *Nat. Rev. Phys* **1**(4), 264 (2019).
3. D. I. Khomskii and S. V. Streltsov, *Chem. Rev.* **121**(5), 2992 (2021).
4. S. Trebst and C. Hickey, *Phys. Rep.* **950**, 1 (2022).
5. J. Q. Yan, S. Okamoto, Y. Wu, Q. Zheng, H. D. Zhou, H. B. Cao, and M. A. McGuire, *Phys. Rev. Materials* **3**, 074405 (2019).
6. L. Viciu, Q. Huang, E. Morosan, H. W. Zandbergen, N. I. Greenbaum, T. M. McQueen, and R. Cava, *J. Solid State Chem.* **180**, 1060 (2007).
7. C. Wong, M. Avdeev, and C. D. Ling, *J. Solid State Chem.* **243**, 18 (2016).
8. E. Vavilova, T. Vasilchikova, A. Vasiliev, D. Mikhailova, V. Nalbandyan, E. Zvereva, and S. V. Streltsov, *Phys. Rev. B* **107**, 054411 (2023).
9. A. I. Liechtenstein, V. I. Anisimov, and J. Zaanen, *Phys. Rev. B* **52**, R5467 (1995).
10. E. A. Zvereva, M. I. Stratan, A. V. Ushakov, V. B. Nalbandyan, I. L. Shukaev, A. V. Silhanek, M. Abdel-Hafez, S. V. Streltsov, and A. N. Vasiliev, *Dalton Trans.* **45**, 7373 (2016).
11. P. A. Maksimov, A. V. Ushakov, Z. V. Pchelkina, Y. Li, S. M. Winter, and S. V. Streltsov, *Phys. Rev. B* **106**, 165131 (2022).
12. G. Kresse and D. Joubert, *Phys. Rev. B* **59**, 1758 (1999).
13. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1396 (1997).
14. M. Gajdos, K. Hummer, G. Kresse, J. Furthmüller, and F. Bechstedt, *Phys. Rev. B* **73**, 045112 (2006).
15. S. Baroni, S. de Gironcoli, A. Dal Corso, and P. Gianozzi, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 515 (2001).
16. J. Knolle, G. W. Chern, D. L. Kovrizhin, R. Moessner, and N. B. Perkins, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 187201 (2014).
17. J. Nasu, J. Knolle, D. L. Kovrizhin, Y. Motome, and R. Moessner, *Nat. Phys.* **12**, 912 (2016).

## Прямое наблюдение пиннинга вихрей Абрикосова в пространственно неоднородном кристалле $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$

М. С. Сидельников<sup>+\*1)</sup>, А. В. Пальниченко<sup>+</sup>, К. С. Перваков<sup>×</sup>, В. А. Власенко<sup>×</sup>, И. И. Зверькова<sup>+</sup>,  
Л. С. Успенская<sup>+</sup>, В. М. Пудалов<sup>×</sup>, Л. Я. Винников<sup>+</sup>

<sup>+</sup> Институт физики твердого тела им. Ю. А. Осипьяна РАН, 142432 Черноголовка, Россия

<sup>\*</sup> Российский квантовый центр, 121205 Москва, Сколково, Россия

<sup>×</sup> Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 23 ноября 2023 г.

После переработки 28 февраля 2024 г.

Принята к публикации 29 февраля 2024 г.

В двухфазном кристалле  $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4/\text{EuFe}_2\text{As}_2$  (1144/122) с помощью метода декорирования магнитными наночастицами обнаружена нехарактерная для сверхпроводящих пниктидов линейная упорядоченность вихрей Абрикосова. Наблюдаемые цепочки вихрей, сонаправленные кристаллографическому направлению  $\langle 110 \rangle$  орторомбической фазы  $\text{EuFe}_2\text{As}_2$ , объясняются пиннингом вихрей в сверхпроводящей фазе 1144 на линейных дефектах, связанных с двойниковыми границами несверхпроводящей фазы 122.

DOI: 10.31857/S1234567824070085, EDN: JGRC AW

Среди железосодержащих сверхпроводников широким спектром электронных и магнитных превращений выделяются соединения на основе  $\text{EuFe}_2\text{As}_2$  [1]. В частности, одним из интересных объектов для исследования сосуществования сверхпроводимости и магнетизма является стехиометрический магнитный сверхпроводник  $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$  [2–6] с температурой сверхпроводящего перехода  $T_{SC} \approx 38$  К и магнитным упорядочением в слоях  $\text{Eu}^{2+}$  при  $T_M \approx 15$  К. Распространенным методом выращивания этих кристаллов является раствор-расплавный метод в собственном флюсе (self-flux) [7]. Бездефектная элементарная ячейка этого стехиометрического соединения имеет длину 1.33 нм и состоит из блоков  $\text{EuFe}_2\text{As}_2$  и  $\text{RbFe}_2\text{As}_2$ , чередующихся вдоль оси  $c$ . В процессе роста кристалла фазы 122 и 1144 конкурируют друг с другом и часто соединение  $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$  имеет примесь родительской фазы  $\text{EuFe}_2\text{As}_2$  (122) [8], которая не переходит в сверхпроводящее состояние при нормальном давлении, но становится антиферромагнитной при  $T_{AFM} \approx 20$  К. Кроме того, в  $\text{EuFe}_2\text{As}_2$  существует структурный переход из объемно-центрированной тетрагональной кристаллической системы ( $I4/mmm$ ) в орторомбическую ( $Fmmm$ ) при понижении температуры ниже 200 К, который сопровождается возникновением двойниковой структуры и спиновым упорядочением атомов Fe

типа волны спиновой плотности (SDW), в то время как в  $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$  структурный переход отсутствует, и его кристаллическая структура при температурах ниже комнатной – примитивная тетрагональная ( $P4/mmm$ ). Ранее несверхпроводящие включения фазы 122 рассматривались только как центры пиннинга вихрей в сверхпроводящей фазе 1144 [8]. В данной работе методом декорирования были визуализированы вихри Абрикосова, изучено их распределение и обнаружены особенности пиннинга вихрей в фазе 1144, обусловленные двойниковой структурой фазы 122.

Исследуемый образец представлял собой кристалл  $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$  размерами  $\approx 7 \times 5 \times 0.25$  мм<sup>3</sup> и был изготовлен по self-flux технологии, описанной в работах [7, 8]. Рентгеноструктурные исследования образца проводились при комнатной температуре. Для проверки образца на монокристалличность была проведена съемка эпиграмм на рентгеновском аппарате УРС-2.0 на Mo-излучении. Образец дает Лауэ-картину с четкими точечными рефлексами. На дифрактограмме, записанной с использованием дифрактометра Rigaku SmartLab SE на  $\text{CuK}\alpha$  излучении ( $\lambda = 1.54178$  Å, 40 кВ, 35 мА) в угловом интервале  $2\Theta = 3\text{--}130^\circ$ , наблюдались две системы порядков отражений, что свидетельствует о присутствии двух фаз (рис. 1а). Параметр  $c$  кристаллической решетки двух фаз составил 13.30 Å и 12.20 Å, что согласуется с литературными данными для  $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$

<sup>1)</sup>e-mail: m.sidelnikov@issp.ac.ru

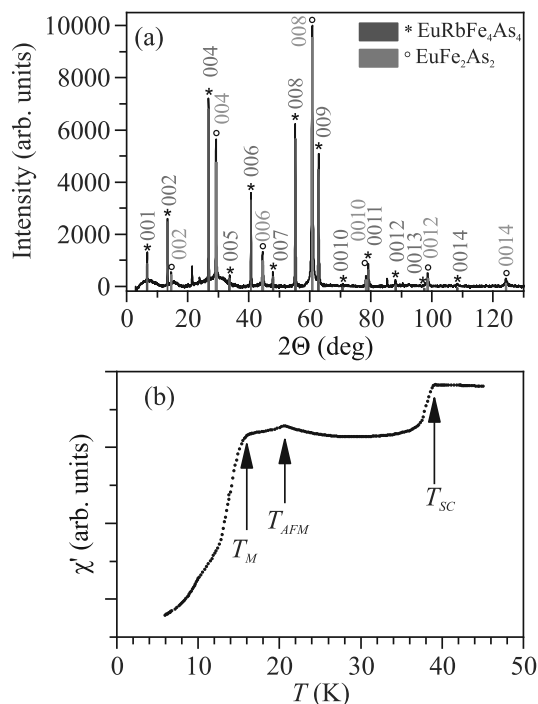


Рис. 1. (Цветной онлайн) Характеризация исследуемого кристалла  $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4/\text{EuFe}_2\text{As}_2$ . (a) – Дифрактограмма кристалла; (b) – температурная зависимость динамической магнитной восприимчивости в переменном поле  $H_0 = 3.5$  мЭ,  $\nu = 1500$  Гц, где  $T_{SC}$  и  $T_M$  соответствуют сверхпроводящему и магнитному переходу в  $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$ ,  $T_{AFM}$  – антиферромагнитному переходу в  $\text{EuFe}_2\text{As}_2$

[9] и  $\text{EuFe}_2\text{As}_2$  [10] соответственно. Элементный анализ кристалла выполнялся методом энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (EDX) на сканирующем электронном микроскопе Zeiss Supra 50 VP. Анализ, проведенный в нескольких областях поверхности кристалла, показал существенный избыток содержания рубидия на поверхности образца:  $\text{Eu} - 13.3 \pm 1.9$ ,  $\text{Rb} - 42.5 \pm 8.1$ ,  $\text{Fe} - 25.9 \pm 3.7$ ,  $\text{As} - 18.3 \pm 2.6$  ат. %. Исследование магнитных свойств выполнялось путем измерения температурных зависимостей действительной части динамической магнитной восприимчивости  $\chi'(t)$  с помощью изготовленного в лаборатории криогенного индукционного магнитометра [11, 12]. Частота переменного внешнего магнитного поля составляла  $\nu = 1500$  Гц, а амплитуда напряженности магнитного поля –  $H_0 = 3.5$  мЭ. В процессе измерений ориентация кристалла относительно магнитного поля была произвольной. Температурная зависимость  $\chi'(t)$  исследованного кристалла представлена на рис. 1b. При понижении температуры наблюдался диамагнитный отклик образца в области 39–40 К, соответствующий температуре

перехода образца в сверхпроводящее состояние [13]. При температуре 21 К на зависимости  $\chi'(t)$  наблюдался пик, характерный для перехода фазы 122 в антиферромагнитное состояние. Последующее уменьшение температуры приводило к заметному падению  $\chi'(t)$  при 15 К, связанному с магнитным упорядочением в слоях  $\text{Eu}$  в  $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$  [14].

Визуализация структуры магнитного потока была выполнена с помощью метода низкотемпературного декорирования магнитными наночастицами [15] – термического испарения железа вблизи образца в разреженной среде гелия. Возникающие в кристалле во внешнем магнитном поле вихри Абрикосова притягивали наночастицы железа, поэтому распределение магнитных частиц на поверхности кристалла отражало вихревую структуру. Одно из преимуществ метода декорирования перед прочими методами визуализации заключалось в удобстве исследования магнитной структуры больших участков поверхности с разрешением до 100 нм, что особенно важно при работе с пространственно неоднородными образцами. Наблюдение вихревой структуры проводилось на подготовленных поверхностях кристалла, полученных путем отщепления верхних слоев с помощью клейкой ленты. Для декорирования образец непосредственно после отщепления помещался во вставку заливного гелиевого криостата и охлаждался в постоянном внешнем магнитном поле  $H$  (FC) до базовой температуры, затем выполнялось 2–3 цикла испарения железа, что приводило к побочному нагреву образца приблизительно на 2–4 К, в зависимости от длительности цикла испарения и базовой температуры. Таким образом, температура образца в момент декорирования была выше базовой температуры на случайную, но измеряемую величину. Эксперименты были выполнены при температурах 8 и 18 К, т. е. как ниже, так и выше температуры магнитного упорядочения в фазе 1144.

На рисунке 2a представлено изображение фрагмента базовой плоскости  $ab$  исследованного образца в оптическом микроскопе после декорирования при  $T = 8.2\text{--}8.9$  К и  $H = 15$  Э. Наблюдались скопления наночастиц железа, отражающие расположение вихрей Абрикосова во время декорирования. Вихри были выстроены преимущественно в цепочки вдоль одного из  $\langle 100 \rangle$  направлений фазы 1144, которое совпадает с границами фасеток. При более детальном рассмотрении картины распределения вихрей были выделены несколько характерных областей. На рисунке 2b в увеличенном масштабе представлена область, в которой расстояние между соседними цепочками варьировалось. Среднее расстояние меж-

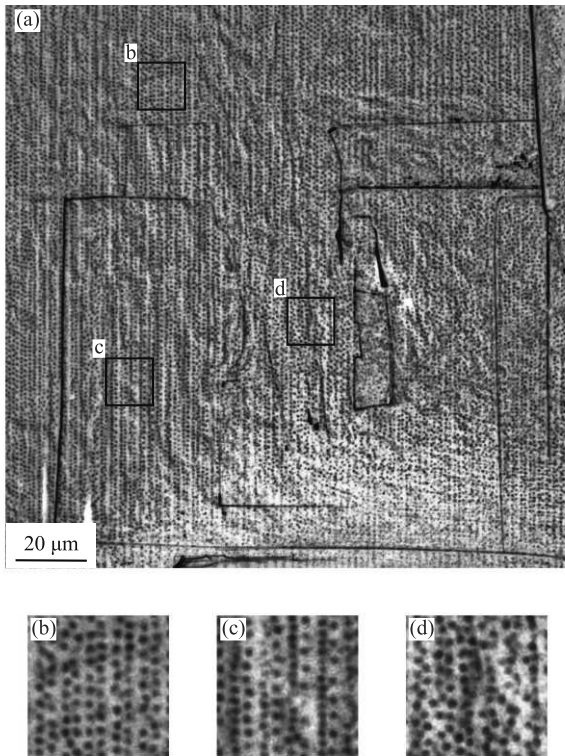


Рис. 2. (Цветной онлайн) Скопления наночастиц железа (темные), визуализирующие вихри Абрикосова на поверхности образца в базовой плоскости  $ab$  при  $T \approx 8 \text{ K}$ ,  $H = 15 \text{ Э}$ . Вихри выстроены преимущественно в вертикальные цепочки. Темные линейные дефекты – границы фасеток, образовавшиеся в результате отщепления поверхности. (a) – Оптическая микрофотография, увеличение  $\times 500$ . (b)–(d) – Характерные особенности вихревой решетки, обсуждаются в тексте. Масштаб рисунков (b)–(d) увеличен в три раза относительно рис. 2a

ду близкими цепочками составило  $1.05 \text{ мкм}$ , в то время как между более удаленными друг от друга цепочками –  $1.49 \text{ мкм}$ . Среднее расстояние между вихрями внутри отдельной цепочки изменялось в интервале от  $1.05$  до  $1.30 \text{ мкм}$  в различных цепочках. На рисунке 2c показана часть вихревой решетки, в которой чередовались цепочки с малым шагом между вихрями ( $0.9 \text{ мкм}$ ) и цепочки с большим шагом (от  $1.3$  до  $1.6 \text{ мкм}$ ). Расстояния между цепочками чередовались аналогично решетке, показанной на рис. 2b. На рисунке 2d представлена малая по площади область, в которой вихри располагались наименее упорядоченно.

На рисунке 3a показана вихревая структура кристалла, полученная в сканирующем электронном микроскопе после отщепления поверхностного слоя толщиной приблизительно  $10 \text{ мкм}$  и декорирования

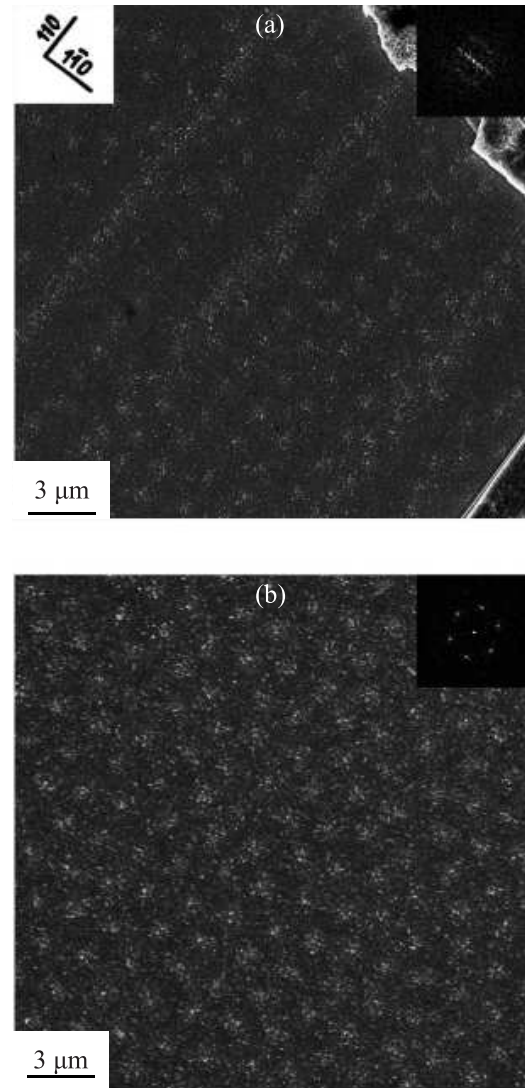


Рис. 3. (a) – Решетка вихрей Абрикосова на неоднородном кристалле  $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$  при  $T_D \approx 18 \text{ K}$ ,  $H = 7.3 \text{ Э}$  (на вставке слева указаны кристаллографические оси в координатах системы 1144); (b) – Правильная гексагональная решетка вихрей Абрикосова на поверхности монокристалла BSCCO-2212. Изображения получены в одном эксперименте. На вставках в правых углах представлены Фурье-образы соответствующей вихревой структуры (в произвольном масштабе)

при  $T = 18.1\text{--}18.9 \text{ K}$ ,  $H = 7.3 \text{ Э}$  (FC). Декорирование также выявило цепочки хорошо разрешимых вихрей, а кроме того – участки, в которых отдельные вихри в линии практически не разрешались. В области, где вихри разрешались, среднее расстояние между вихрями в цепочках составило  $1.6\text{--}1.75 \text{ мкм}$ , а расстояние между цепочками –  $1.7 \text{ мкм}$ .

В экспериментах с декорированием в качестве образца-свидетеля использовался сверхпроводящий



монокристалл  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$  (BSCCO-2212), в котором в режиме FC формируется правильная треугольная вихревая решетка. На рисунке 3а и б для сравнения представлены вихревые решетки на поверхности исследуемого кристалла  $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4/\text{EuFe}_2\text{As}_2$  и BSCCO соответственно, полученные в том же эксперименте. Отдельные вихри на BSCCO хорошо разрешались, их плотность составила  $0.352 \text{ мкм}^{-2}$ , что точно соотносилось с внешним полем  $7.3 \text{ Э}$ . На вставках представлены Фурье-картины, подчеркивающие упорядоченность вихрей в линии (рис. 3а) и в треугольную решетку (рис. 3б), а также большее межвихревое расстояние в исследуемом кристалле, чем в BSCCO. Следует отметить различие в наблюдаемом диаметре изображения вихрей Абрикосова в  $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$  ( $\approx 1.1 \text{ мкм}$ ) и BSCCO ( $\approx 1.3 \text{ мкм}$ ).

Также следует отметить, что в дальнейшем три отщепления от того же кристалла поверхностных слоев с суммарной толщиной  $\sim 15 \text{ мкм}$  привели к исчезновению сверхпроводимости в образце, что подтверждалось отсутствием вихрей Абрикосова при декорировании, а также отсутствием диамагнитного отклика магнитной восприимчивости  $\chi'(t)$  вблизи температуры  $40 \text{ К}$ . Элементный анализ (EDX) после отщепления слоев показал отсутствие рубидия на поверхности образца, а его атомарный состав соответствовал  $\text{EuFe}_2\text{As}_2$ . В этой связи можно заключить, что сверхпроводящая фаза 1144 формировала приповерхностный слой образца, удаленный эксфолиацией, а большая часть кристалла являлась родительской фазой 122.

Полученные результаты можно интерпретировать следующим образом. Исследованный в данной работе образец обладает линейно упорядоченной вихревой структурой, что нехарактерно для железосодержащих сверхпроводников. Ранее наблюдаемые на монокристаллах  $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$  вихревые решетки являлись неупорядоченными ввиду собственного (intrinsic) пиннинга [16]. На рисунке 4 показана решетка вихрей Абрикосова на поверхности монокристалла  $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$ , исследованного в работе [17], который был выращен методом твердофазной реакции [13] и не имел выраженных признаков фазы  $\text{EuFe}_2\text{As}_2$ . Упорядоченность в такой вихревой решетке отсутствует, что подтверждается Фурье образом.

Линейная структура вихрей Абрикосова наблюдалась ранее в сверхпроводящих кристаллах с двойникованием, в частности, в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$  [18], где подобная упорядоченность была вызвана пиннингом вихрей на двойниковых границах, а также в сверхпроводящих борокарбидах [19], в которых пиннинг

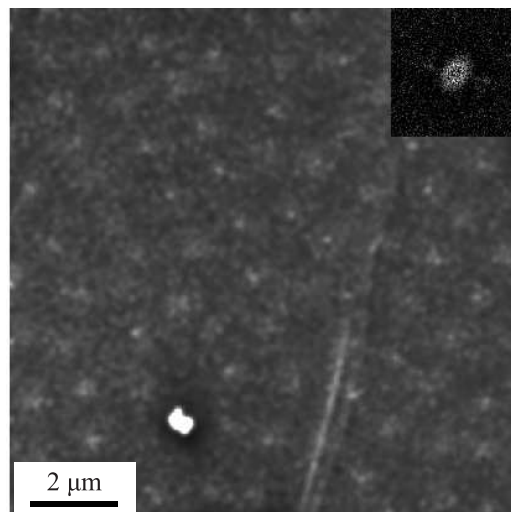


Рис. 4. Решетка вихрей Абрикосова на монокристалле  $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$  в отсутствие фазы  $\text{EuFe}_2\text{As}_2$  при  $T_D \approx 8 \text{ К}$ ,  $H \approx 25 \text{ Э}$  и соответствующий Фурье-образ

был вызван сильными полями рассеяния на границах антиферромагнитных доменов, совпадающих с двойниковыми границами [20].

Двойниковой структуры в  $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$  не наблюдалось, в отличие от  $\text{EuFe}_2\text{As}_2$ , где она выявлена при  $T \leq T_{\text{twin}} \approx 190 \text{ К}$  с помощью нейтронных исследований в [21] и прямой визуализацией в работе [22]. Как упоминалось выше (рис. 1а), исходно в изученном кристалле было обнаружено сосуществование фаз 1144 и 122, а последующее снятие поверхностного слоя привело к полному удалению сверхпроводящей фазы 1144, что подтверждалось отсутствием диамагнитного уменьшения магнитной восприимчивости вблизи температуры  $40 \text{ К}$ . Таким образом было определено, что сверхпроводящая фаза 1144 располагалась только в приповерхностном слое толщиной  $\sim 15 \text{ мкм}$  над фазой 122 и испытывала влияние двойников фазы 122, о чем свидетельствовала упорядоченность вихрей вдоль направления  $\langle 100 \rangle_T$ , совпадающего с направлением двойниковых границ в фазе 122, а также соответствие расстояния между цепочками вихрей и расстояния между двойниковыми границами, определенного в [22].

Определение точного механизма пиннинга вихрей в фазе 1144, обусловленного двойниковыми границами в фазе 122, требует дополнительных исследований, но можно сделать следующее предположение. По-видимому, двойникование фазы 122 приводит к механической деформации тонкого слоя фазы 1144, выросшего на фазе 122. Поскольку участки фазы 1144, расположенные над соседними двойниковыми доменами, деформируются во взаимно-

перпендикулярных направлениях (в соответствии с направлениями осей  $a$  и  $b$  ромбической фазы 122), то над двойниковой границей, как и в фазе 122, должны возникать сильные напряжения. В таком случае именно в области двойниковых границ магнитное поле будет легко проникать в сверхпроводник. В результате напряжения могут образоваться реальные двойниковые границы с подавленным параметром порядка, как в случае с  $\text{YBaCuO}$  [23]. Последнее предположение требует дальнейшего изучения с привлечением низкотемпературной рентгенографии. В качестве альтернативного механизма упорядочения вихрей рассматривалось влияние магнитных полей рассеяния на двойниковых границах, как в случае борокарбидов [20], однако при декорировании плоскости  $ab$  кристалла  $\text{EuFe}_2\text{As}_2$  в перпендикулярных полях без сверхпроводящей фазы двойниковые границы не визуализировались ни методом декорирования, ни магнито-оптическим методом [22], в отличие от работы [20], где исследовались  $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$  и  $\text{TbNi}_2\text{B}_2\text{C}$ . Это позволяет предположить, что поля рассеяния на двойниковых границах  $\text{EuFe}_2\text{As}_2$  очень малы и недостаточны для заметного пиннинга вихрей.

В работе [23] рассчитывался потенциал пиннинга вихрей на одиночной двойниковой границе кристаллов  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$  с подавленным параметром порядка, исходя из уменьшения межвихревого расстояния на двойниковой границе  $a_b$  по сравнению с межвихревым расстоянием в объеме двойника  $a_v$ . Оценка потенциала пиннинга для этой области может быть сделана по формуле из работы [23]:

$$U_p = \frac{\Phi_0^2}{8\sqrt{2}\pi^{3/2}\lambda^2} \times \left[ \left(\frac{a_b}{\lambda}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{a_b}{\lambda}\right) - \frac{3}{2} \left(\frac{a_v}{\lambda}\right) \exp\left(-\frac{a_v}{\lambda}\right) \right],$$

где  $\Phi_0$  – квант магнитного потока,  $\lambda$  – глубина проникновения магнитного поля,  $a_b$  и  $a_v$  – межвихревые расстояния на двойниковой границе и в объеме двойника соответственно. Со следующими допущениями можно оценить потенциал пиннинга в нашем случае: за  $a_b$  считать межвихревое расстояние в цепочках с малым шагом, а за  $a_v$  – межвихревое расстояние в цепочках с большим шагом (рис. 2с). Исходя из литературных данных [24] и наших оценок видимого диаметра изображения вихрей (рис. 3) для  $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$  и  $\text{BSCCO}$  с известной глубиной проникновения [25], глубина проникновения для  $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$  принималась равной 130 нм. Такая оценка дает значение  $U_p \sim 3 \cdot 10^{-8}$  эрг/см в поле 15 Э,

что по порядку сходится с потенциалом пиннинга в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$ .

Таким образом, методом низкотемпературного декорирования магнитными наночастицами была визуализирована решетка вихрей Абрикосова в неоднородном кристалле железосодержащего сверхпроводника, который представлял собой квазиэпитаксиальную пленку сверхпроводящей фазы  $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$  толщиной  $\sim 15$  мкм на подложке несверхпроводящей родительской фазы  $\text{EuFe}_2\text{As}_2$  с двойниками. В системе 1144 впервые было обнаружено упорядочение вихрей в цепочки, а направление цепочек совпало с направлением двойниковых границ фазы 122, что объясняется пиннингом в областях механического напряжения фазы 1144 над двойниковыми границами фазы 122. Наблюдаемое упорядочение вихрей над двойниковыми границами можно рассматривать как один из способов управления вихревой структурой, который может найти техническое приложение, например, при производстве сверхпроводящих лент для катушек магнитов из железосодержащих сверхпроводников [26]. Влияние подложки представляет самостоятельный интерес, поскольку для крупномасштабного применения высокотемпературных сверхпроводников используются эпитаксиальные тонкопленочные структуры на монокристаллических подложках [27].

Авторы выражают благодарность Е. Ю. Постновой за работу на электронном микроскопе, С. С. Хасанову за обсуждение результатов, Л. Г. Исаевой, В. Н. Шилову и А. Н. Россоленко за техническую поддержку.

**Финансирование работы.** Рост кристаллов выполнен в рамках гранта Российского научного фонда # 21-13-00307 с использованием оборудования Центра коллективного пользования Физического института им. П.Н. Лебедева Российской академии наук. Работа частично выполнена в рамках государственного задания Института физики твердого тела им. Ю. А. Осипьяна Российской академии наук.

**Конфликт интересов.** Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

1. S. Zapf and M. Dressel, Rep. Prog. Phys. **80**, 016501 (2017).
2. M. P. Smylie, K. Willa, J.-K. Bao, K. Ryan, Z. Islam, H. Claus, Y. Simsek, Z. Diao, A. Rydh, A. E. Koshelev, W.-K. Kwok, D. Y. Chung, M. G. Kanatzidis, and U. Welp, Phys. Rev. B **98**, 104503 (2018).
3. Zh. Devizorova and A. Buzdin, Phys. Rev. B **100**, 104523 (2019).

4. K. Iida, Y. Nagai, S. Ishida et al. (Collaboration), *Phys. Rev. B* **100**, 104506 (2019).
5. T. K. Kim, K. S. Pervakov, D. V. Evtushinsky et al. (Collaboration), *Phys. Rev. B* **103**, 174517 (2021).
6. V. S. Stolyarov, K. S. Pervakov, A. S. Astrakhantseva, I. A. Golovchanskiy, D. V. Vyalikh, T. K. Kim, S. V. Ereemeev, V. A. Vlasenko, V. M. Pudalov, A. A. Golubov, E. V. Chulkov, and D. Roditchev, *J. Phys. Chem. Lett.* **11**, 9393 (2020).
7. Т. К. КИМ, К. С. Перваков, В. А. Власенко и др., *УФН* **192**, 790 (2022).
8. A. Yu. Degtyarenko, I. A. Karataev, A. V. Ovcharov, V. A. Vlasenko, and K. S. Pervakov, *Nanomaterials* **12** (21), 3801 (2022).
9. J.-K. Bao, K. Willa, M. P. Smylie, H. Chen, U. Welp, D. Y. Chung, and M. G. Kanatzidis, *Cryst. Growth Des.* **18**, 3517 (2018).
10. M. Tegel, M. Rotter, V. Weiß, F. Schappacher, R. Pottgen, and D. Johrendt, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 452201 (2008).
11. M. A. Kuzovnikov, V. E. Antonov, V. I. Kulakov, V. D. Muzalevsky, N. S. Orlov, A. V. Palnichenko, and Yu. M. Shulga, *Phys. Rev. Mater.* **7**, 024803 (2023)
12. D.-X. Chen and V. Skumryev, *Review of Scientific Instruments* **81**, 025104 (2010).
13. Y. Liu, Y.-B. Liu, Z.-T. Tang, H. Jiang, Zh. Wang, A. Ablimit, W. Jiao, Q. Tao, Ch. Feng, Zh. Xu, and G.-H. Cao, *Phys. Rev. B* **93**, 214503 (2016).
14. S. Jiang, Y. Luo, Z. Ren, Z. Zhu, C. Wang, X. Xu, Q. Tao, G. Cao, and Zh. Xu, *New J. Phys.* **11**, 025007 (2009).
15. Л. Я. Винников, И. С. Вещунов, М. С. Сидельников, В. С. Столяров, *Приборы и техника эксперимента* **4**, 790 (2022).
16. Л. Я. Винников, А. Г. Трошина, И. С. Вещунов, Д. Аналитис, И. Фишер, Ю. Лиу, Ч. Т. Лин, Л. Фанг, Ю. Уэли, В. К. Квук, *Письма в ЖЭТФ* **96** (10), 728 (2012).
17. V. S. Stolyarov, A. Casano, M. A. Belyanchikov et al. (Collaboration), *Phys. Rev. B* **98**, 140506 (R) (2018).
18. L. Ya. Vinnikov, L. A. Gurevich, G. A. Yemelchenko et al. (Collaboration), *Solid State Commun.* **67**, 421 (1988).
19. L. Ya. Vinnikov, J. Anderegg, S. L. Bud'ko, P. C. Canfield, and V. G. Kogan, *Phys. Rev. B* **71**, 224513 (2005).
20. L. Ya. Vinnikov, I. S. Veshchunov, S. L. Bud'ko, P. C. Canfield, and V. G. Kogan, *J. Phys.: Conf. Ser.* **150**, 052279 (2009).
21. Y. Xiao, Y. Su, M. Meven, R. Mittal, C. M. N. Kumar, T. Chatterji, S. Price, J. Persson, N. Kumar, S. K. Dhar, A. Thamizhavel, and Th. Brueckel, *Phys. Rev. B* **80**, 174424 (2009).
22. L. S. Uspenskaya, M. S. Sidelnikov, K. S. Pervakov, V. A. Vlasenko, and L. Ya. Vinnikov, *J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech.* **18**(1), 47 (2024).
23. Л. Я. Винников, И. В. Григорьева, Л. А. Гуревич, А. Е. Кошелев, *Сверхпроводимость: физика, химия, техника* **3**(7), 1434 (1990).
24. D. Collomb, S. J. Bending, A. E. Koshelev, M. P. Smylie, L. Farrar, J.-K. Bao, D. Y. Chung, M. G. Kanatzidis, W.-K. Kwok, and U. Welp, *Phys. Rev. Lett.* **126**, 157001 (2021).
25. G. Blatter, M. V. Feigel'man, V. B. Geshkenbein, A. I. Larkin, and V. M. Vinokur, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 1125 (1994).
26. D. Wang, Zh. Zhang, X. Zhang, D. Jiang, Ch. Dong, H. Huang, W. Chen, Q. Xu, and Y. Ma, *Supercond. Sci. Technol.* **32**, 04LT01 (2019).
27. A. A. Thomas, I. A. Shipulin, S. Holleis, M. Eisterer, K. Nielsch, and R. Huhne, *Supercond. Sci. Technol.* **34**, 115013 (2021).

# Низкотемпературная кристаллизация дефектов структуры в $\text{LuV}_{12}$ по данным ЯМР спектроскопии $^{175}\text{Lu}$

О. М. Вяселев<sup>a,b,1)</sup>, А. А. Гиппиус<sup>c,d</sup>, Н. Е. Случанко<sup>e</sup>, Н. Ю. Шицевалова<sup>f</sup>

<sup>a</sup>Институт физики твердого тела имени Ю. А. Осипьяна РАН, 142432 Черноголовка, Россия

<sup>b</sup>Российский квантовый центр, 121205 Москва, Инновационный центр Сколково, Россия

<sup>c</sup>МГУ имени М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

<sup>d</sup>Физический институт имени П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

<sup>e</sup>Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН, 119991 Москва, Россия

<sup>f</sup>Институт проблем материаловедения им. И. Н. Францевича НАНУ, 03680 Киев, Украина

Поступила в редакцию 2 марта 2024 г.

После переработки 2 марта 2024 г.

Принята к публикации 4 марта 2024 г.

Исследования додекаборида  $\text{LuV}_{12}$  в температурном диапазоне 10–300 К показали, что спектр  $^{175}\text{Lu}$  уширен вследствие разброса квадрупольных сдвигов частоты, вызванного наличием дефектов в подрешетке Lu. Для объяснения обнаруженного гистерезиса температурной зависимости ширины линии  $^{175}\text{Lu}$  предложен сценарий “кристаллизации дефектов структуры”, в котором дефекты подрешетки Lu, разупорядоченные при комнатной температуре, трансформируются при понижении температуры в более симметричную и устойчивую конфигурацию, обусловленную, по-видимому, статическими искажениями борного каркаса благодаря кооперативному эффекту Яна–Теллера.

DOI: 10.31857/S1234567824070097, EDN: FZOQQK

1.  $\text{LuV}_{12}$  кристаллизуется в гцк структуре типа NaCl (пр. гр.  $Fm\bar{3}m-O_h^5$ ), где позиции Cl занимают центры кубооктаэдров  $\text{V}_{12}$ , а Na – атомы Lu [1]. Основной структуры являются кубооктаэдры  $\text{V}_{12}$ , образующие плотнейшую кубическую упаковку. Между ними в пустотах этого жесткого трехмерного каркаса расположены атомы Lu. Структуру также можно описать как модифицированную гцк решетку с металлическим ионом  $\text{Lu}^{+3}$ , локализованным в центре усеченного октаэдра  $\text{V}_{24}$ , образованного анионными группами  $\text{V}_{12}$ . В отличие от жестких ковалентных связей В–В, связи Lu–В и Lu–Lu существенно слабее из-за малого ионного радиуса катиона  $\text{Lu}^{+3}$  по сравнению с размером полости  $\text{V}_{24}$ , что может приводить к среднестатистическому смещению иона  $\text{Lu}^{+3}$  из центра  $\text{V}_{24}$  – например, при наличии дефектов в структуре.

Кубическая модель структуры  $\text{LuV}_{12}$  хорошо описывает средние положения атомов в ячейке, но не согласуется с наблюдаемой анизотропией транспортных свойств [2, 3]. Рентгеноструктурные исследования редкоземельных додекаборидов сообщают о небольших ( $\sim 0.03\%$ ) статических нарушениях кубической метрики гцк решетки [4] благодаря кооперативному эффекту Яна–Теллера (КЭЯТ) [5], приводящему к образованию динамических зарядовых полос (*dynamic charge stripes*) при температурах ниже  $\sim 60$  К [1]. Обусловленная КЭЯТ тенденция к искажению борной подрешетки, с одной стороны, и жесткость борного каркаса, препятствующая масштабной перестройке гцк структуры, с другой, может проявляться в виде скрытых фазовых переходов [6], влияющих на их магнитные, транспортные и тепловые свойства.

В этой связи представляется важным подробное изучение эволюции кристаллической структуры  $\text{LuV}_{12}$  с изменением температуры в широком диапазоне. Ядерный магнитный/квадрупольный резонанс (ЯМР/ЯКР) при наличии подходящего ядерного зонда (ядра со спином  $I > 1/2$ ) и ненулевого градиента электрического поля (ГЭП) на позиции ядра является эффективным инструментом исследования структурных изменений. В случае  $\text{LuV}_{12}$  ядра бора ( $^{10}\text{I} = 3$ ,  $^{11}\text{I} = 3/2$ ) хотя и находятся в аксиально-симметричном ненулевом ГЭП [7], малочувствительны к структурным искажениям ввиду малости квадрупольного момента бора  $^{10,11}\text{Q} = (4-8.5) \times 10^{-2}$  барн [8]. В данной работе представ-

ческой метрики гцк решетки [4] благодаря кооперативному эффекту Яна–Теллера (КЭЯТ) [5], приводящему к образованию динамических зарядовых полос (*dynamic charge stripes*) при температурах ниже  $\sim 60$  К [1]. Обусловленная КЭЯТ тенденция к искажению борной подрешетки, с одной стороны, и жесткость борного каркаса, препятствующая масштабной перестройке гцк структуры, с другой, может проявляться в виде скрытых фазовых переходов [6], влияющих на их магнитные, транспортные и тепловые свойства.

В этой связи представляется важным подробное изучение эволюции кристаллической структуры  $\text{LuV}_{12}$  с изменением температуры в широком диапазоне. Ядерный магнитный/квадрупольный резонанс (ЯМР/ЯКР) при наличии подходящего ядерного зонда (ядра со спином  $I > 1/2$ ) и ненулевого градиента электрического поля (ГЭП) на позиции ядра является эффективным инструментом исследования структурных изменений. В случае  $\text{LuV}_{12}$  ядра бора ( $^{10}\text{I} = 3$ ,  $^{11}\text{I} = 3/2$ ) хотя и находятся в аксиально-симметричном ненулевом ГЭП [7], малочувствительны к структурным искажениям ввиду малости квадрупольного момента бора  $^{10,11}\text{Q} = (4-8.5) \times 10^{-2}$  барн [8]. В данной работе представ-

<sup>1)</sup>e-mail: vyasel@issp.ac.ru

лены результаты измерения температурного изменения ширины линии ЯМР  $^{175}\text{Lu}$  в образце  $\text{LuB}_{12}$ . Номинально атом Lu находится в позиции (0, 0, 0), относящейся к кубической точечной группе симметрии  $m\bar{3}m$ , на которой ГЭП равен нулю, в связи с чем квадрупольные эффекты отсутствуют. Однако при наличии дефектов структуры (искажений решетки, вакансий, смещений атомов Lu из центрально-симметричных позиций в полостях  $\text{B}_{24}$ ) локальное понижение симметрии приводит к ненулевому ГЭП и, как следствие, появлению эффектов, связанных с ядерными квадрупольными взаимодействиями. Благодаря большим значениям спина ( $^{175}I = 7/2$ ) и квадрупольного момента ( $^{175}Q = 3.5$  барн [8]) ядра  $^{175}\text{Lu}$  его спектр ЯМР является перспективным инструментом для исследования структурных дефектов.

**2.** Порошок  $\text{Lu}^{11}\text{B}_{12}$  (размер зерна  $\leq 5$  мкм) получен синтезом из изотопически обогащенного мелкокристаллического порошка бора  $^{11}\text{B}$  (Ceradyne Inc., formerly Eagle Picher Inc., USA),  $^{11}\text{B}$  обогащение 99.5 %, чистота 99.9 масс %, и порошка оксида лутеция  $\text{Lu}_2\text{O}_3$  с чистотой 99.9985 масс %. Детали синтеза представлены в дополнительной информации к [3]. Поскольку  $\text{LuB}_{12}$  обладает хорошей электропроводностью [9], для проведения ЯМР измерений порошок  $\text{LuB}_{12}$  был смешан с расплавленным парафином в объемной пропорции  $\sim 1:1$  и залит в капсулу  $\varnothing 4$  мм длиной 10 мм. ЯМР измерения проведены в поле  $B_0 = 7.000 \pm 0.001$  Тл на частоте  $\nu_{\text{res}} = 33709.7$  кГц с помощью спектрометра Bruker MSL300, оборудованного проточным криостатом Oxford CF1200. Обычная скорость изменения температуры составляла  $5 \pm 1$  К/мин; остановка для проведения измерений в зависимости от температуры и типа измерений составляла 1–3 часа, включая паузу 15–30 мин для стабилизации заданной температуры с точностью 0.1 К.

Длительность  $\pi/2$ -импульса  $t_{\pi/2}$  составляла 4.3 мкс. Для измерения сигналов эхо использовалась последовательность “ $t_p$ - $\tau$ - $t_p$ - $\tau_1$ -запись” с  $t_p = 1.7$  мкс ( $\sim \pi/5$ ) с чередованием фаз, обеспечивающим накопление только сигнала эхо [10]. Спектры  $^{175}\text{Lu}$  получены быстрым Фурье-преобразованием (БФП) второй половины эхо с  $\tau_1 = \tau$ .

**3.** На рисунке 1 сигнал эхо  $^{175}\text{Lu}$  с  $\tau = 100$  мкс, измеренный при  $T = 160$  К после охлаждения от комнатной температуры, показан в полулогарифмическом масштабе как функция  $t/\tau$ , где  $t$  – промежуток времени после первого импульса. Видно, что, помимо основного сильного сигнала, фокусирующегося при  $t/\tau = 2$  и свойственного для обычного спин-эхо, наблюдается ряд эхоподобных особенностей при дру-

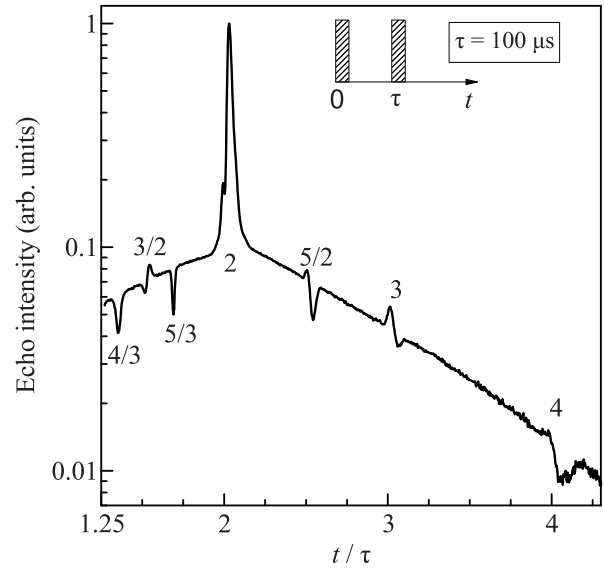


Рис. 1. Временная диаграмма спинового эхо  $^{175}\text{Lu}$  в  $\text{LuB}_{12}$ , измеренного при  $T = 160$  К после охлаждения от комнатной температуры. Числа на рисунке соответствуют значениям  $t/\tau$

гих значениях  $t/\tau$ . Такого вида отклик на двухимпульсную последовательность характерен для ЯМР в несовершенных кубических кристаллах на ядрах со спином  $I > 3/2$  [11, 12], а особенности при  $t/\tau \neq 2$  являются так называемыми “эхо Соломона” [13]. В данном отклике (рис. 1) широкий “пьедестал” образован сигналом центрального перехода  $1/2 \leftrightarrow -1/2$ . Узкое “композитное” эхо при  $t/\tau = 2$  сформировано всеми сателлитными переходами с  $m \leftrightarrow m - 1/2$  для  $m \neq 1/2$  ( $m = 7/2, 5/2, \dots, -5/2$ ). Сигналы, наблюдаемые при  $t/\tau = 3$  (4), образованы, соответственно, переходами  $1/2 \leftrightarrow 3/2$  ( $-1/2 \leftrightarrow -3/2$ ); при  $t/\tau = 3/2$  ( $5/2 - 3/2 \leftrightarrow 5/2 - (-3/2 \leftrightarrow 5/2)$ ), при  $t/\tau = 4/3$  ( $5/3 - 5/2 \leftrightarrow 7/2 - (-5/2 \leftrightarrow 7/2)$ ). Только эти “разрешенные” эхо Соломона [13, 14] формируются при использовании “жестких” импульсов, для которых выполняется условие  $^{175}\gamma B_1 > 2\pi\nu_Q$ , где  $^{175}\gamma/2\pi = 4.86$  МГц/Тл – гиромангнитное отношение  $^{175}\text{Lu}$ ,  $B_1$  – амплитуда переменного поля ( $\mathbf{B}_1 \perp \mathbf{B}_0$ ),  $\nu_Q$  – средняя частота квадрупольных взаимодействий, обусловленных ненулевым ГЭП на позиции ядра [15]. В случае “мягких” импульсов с  $^{175}\gamma B_1 < 2\pi\nu_Q$  теоретически предсказано формирование “запрещенных” эхо Соломона при иных значениях  $t/\tau$  [13, 14], которые не наблюдаются на рис. 1. Поскольку  $^{175}\gamma B_1/2\pi = \nu_1 = (4t_{\pi/2})^{-1} = 58$  кГц, отсутствие сигналов запрещенного эхо позволяет оценить значение  $\nu_Q < 58$  кГц.

**4.** На рисунке 2 показан спектр ЯМР  $^{175}\text{Lu}$ , измеренный при  $T = 160$  К после охлаждения от комнатной температуры, полученный путем быстрого

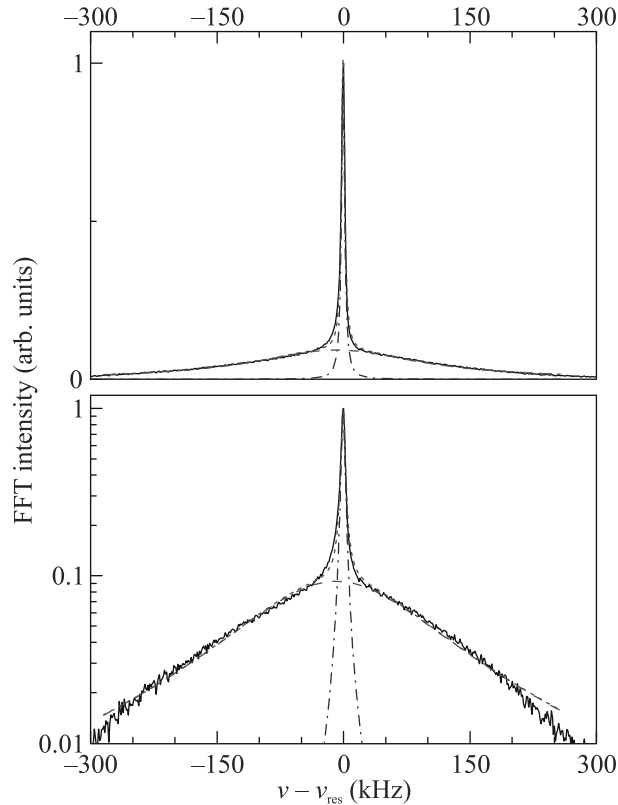


Рис. 2. Спектр ЯМР  $^{175}\text{Lu}$  при  $T = 160\text{ K}$  (при охлаждении от комнатной температуры), полученный БФТ второй половины эхо  $^{175}\text{Lu}$  с  $\tau = 220\text{ мкс}$ . Верхняя панель – линейный масштаб; нижняя – полулогарифмический. Штрихпунктирная (синяя) и штриховая (красная) линии – аппроксимация по формуле (1), зеленая линия коротких штрихов – их сумма

преобразования Фурье (БФТ) второй половины эхо  $^{175}\text{Lu}$  с  $\tau = 220\text{ мкс}$ . Большое значение  $\tau$  (по сравнению с рис. 1) выбрано с тем, чтобы избежать влияния пиков эхо Соломона на спектр. Заметно, что спектр состоит из широкого “пьедестала” и узкого пика, центрированных на частотах, близких к  $\nu_{\text{res}}$ . Измерения времен спин-решеточной и спин-спиновой релаксации ( $T_1$  и  $T_2$ , соответственно) на центре узкого пика ( $\nu - \nu_{\text{res}} = 0$ ) и вне его ( $\nu - \nu_{\text{res}} = 50\text{ кГц}$ ) показали, что как  $T_1$ , так и  $T_2$  не имеют спектральной зависимости во всем температурном интервале. Это свидетельствует в пользу того, что наличие узкого и широкого пиков в спектре не связано с фазовым расслоением образца. Таким образом очевидно, что узкий пик соответствует центральному переходу  $1/2 \leftrightarrow -1/2$ , а широкий “композитный” – всем спутанным переходам: частотный сдвиг из-за квадрупольных взаимодействий для центрального перехода возникает только во втором порядке теории возмущений, вследствие чего уширение линии централь-

ного перехода  $\Delta_{\text{II}} \propto \nu_Q^2/\nu_{\text{res}}$ , а для спутанных – в первом порядке, в связи с чем  $\Delta_{\text{I}} \propto \nu_Q$  [15]. Во всем интервале температур 10–300 K спектр  $I(\nu)$  хорошо аппроксимируется суммой двух лоренцианов,  $I(\nu) = L_{\text{I}}(\nu) + L_{\text{II}}(\nu)$ ,

$$L_i = \frac{2A_i}{\pi} \frac{\Delta_i}{4(\nu - \nu_{c,i})^2 + \Delta_i^2}, \quad (1)$$

где  $i$  индексирует широкий ( $i = \text{I}$ ) и узкий ( $i = \text{II}$ ) пики,  $A$  – площадь под кривой,  $\Delta$  – ширина на половине высоты,  $\nu_c$  – центр линии. На рисунке 2 показаны результаты аппроксимации для узкого (синяя штрихпунктирная линия) и широкого пиков (красная штриховая линия) и их сумма (зеленая линия коротких штрихов). Во всем исследованном диапазоне температур  $\Delta_{\text{I}}/\Delta_{\text{II}} \gtrsim 30$ . Анализу температурных зависимостей  $\nu_c$  и  $\Delta_{\text{II}}$  посвящена отдельная публикация.

5. На рисунке 3 представлены температурные зависимости ширины широкого пика,  $\Delta_{\text{I}}$ , полученной при аппроксимации спектров ЯМР  $^{175}\text{Lu}$  по формуле (1), измеренные в нескольких циклах “охлаждение–

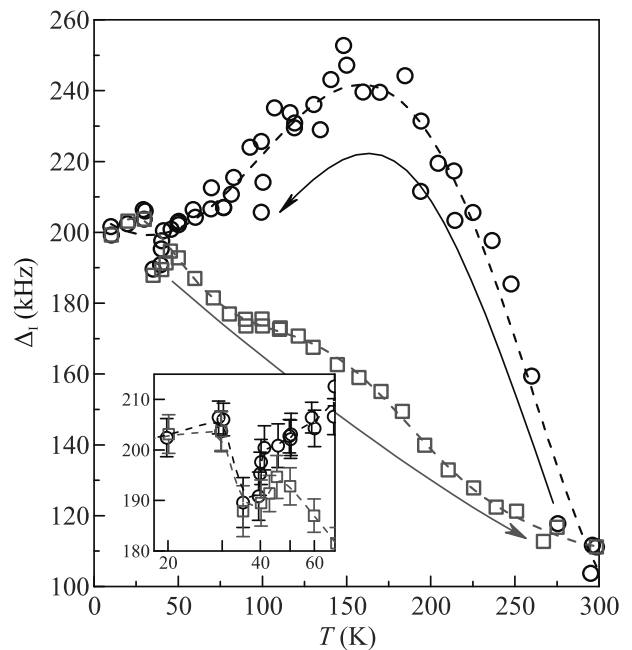


Рис. 3. Температурные зависимости  $\Delta_{\text{I}}$ , полученные в результате нескольких циклов “охлаждение от комнатной температуры (кружки) – отогрев от 10 K (квадраты)”. Стрелки указывают направление изменения температуры. На вставке в увеличенном полулогарифмическом масштабе показана область температур 20–70 K

отогрев”. Размеры символов соответствуют среднеквадратичной ошибке  $\delta\Delta_{\text{I}}$  при аппроксимации спектров по формуле (1). Разброс  $\Delta_{\text{I}}$  при охлаждении,

значительно превышающий  $\delta\Delta_I$ , соответствует разным циклам; при этом данные при отогреве находятся в пределах  $\delta\Delta_I$ . Хорошо видно, что кривые  $\Delta_I(T)$ , снятые при охлаждении и отогреве, заметно отличаются, определяя температурный гистерезис  $\Delta_I$ . Измерения, проведенные после максимально быстрого (6 К/мин) и медленного (1 К/мин) охлаждения от комнатной температуры до 150 и 80 К, а также после 15-часовых выдержек (на охлаждении от комнатной температуры при 150 К, на отогреве от 10 К при 140 и 240 К), приводят к результатам, статистически совпадающим с данными рис. 3.

**6.** Ширина линии ЯМР  $\Delta_I$ , обусловленная разбросом частотных сдвигов квадрупольных взаимодействий I порядка, ожидаемо меньше при большей температуре благодаря эффекту динамического сужения [15] вследствие естественной термической подвижности слабо связанных ионов лутеция, ограниченных каркасом  $\text{B}_{24}$ . При этом, как упомянуто выше в п. 4, во всем исследованном температурном интервале  $\Delta_I$  как минимум в 30 раз больше ширины линии центрального перехода. Это указывает на наличие дефектных позиций Lu со средним временем жизни  $\tau_d > T_2$ , где  $T_2$  – время поперечной релаксации. В  $\text{LuB}_{12}$   $T_2 = 0.65 \pm 0.05$  мс в интервале 10–300 К [16]. Таким образом, на временных интервалах  $t < \tau_d$  расположение атомов Lu в полостях  $\text{B}_{24}$  разупорядочено [16], в том числе при комнатной температуре.

Температурное поведение  $\Delta_I$  (рис. 3) невозможно объяснить лишь эффектом динамического сужения: уменьшение частоты флуктуаций  $\nu_f$  атомов Lu при охлаждении приведет к монотонному росту  $\Delta_I(T)$  вплоть до значения  $\Delta_{\max}$  статического разброса квадрупольных сдвигов при  $\nu_f < \Delta_{\max}$ ; при дальнейшем охлаждении  $\Delta_I$  становится температурно-независимой. Наличие экстремума  $\Delta_I(T)$  вблизи 150 К можно было бы приписать весьма экзотическому росту  $\nu_f$  при охлаждении, но даже в этом случае при достаточно медленном увеличении температуры кривая  $\Delta_I(T)$  должна воспроизводить траекторию охлаждения, что не наблюдается в эксперименте (рис. 3).

**7.** Наблюдаемую на рис. 3 зависимость  $\Delta_I(T)$  может описать феноменологическая концепция “кристаллизации дефектов” атомов Lu в полостях  $\text{B}_{24}$ . Предполагается, что при  $T \rightarrow 0$  атомы Lu в полостях  $\text{B}_{24}$  находятся в более упорядоченном состоянии, характеризуемым меньшими смещениями относительно кубической позиции (0, 0, 0) и, соответственно, меньшим средним значением ГЭП, чем при комнатной температуре. Причиной тому может быть вызванное КЭЯТ ферродисторсионное упорядочение

локальных искажений кубооктаэдров  $\text{B}_{12}$ , при котором происходит удлинение кубооктаэдров вдоль направления [111] и сжатие в плоскости (111) [5]. Это приводит к некоторому уменьшению расстояния и увеличению взаимодействия между РЗ ионами в плоскости (111), что может уменьшить смещения атомов Lu в этой плоскости.

Низкотемпературное упорядоченное состояние атомов Lu подразумевает наличие потенциальной ямы глубиной  $U$ , определяющей их конфигурацию в полостях  $\text{B}_{24}$ . При  $T \gg T_U = U/k_B$  система полностью разупорядочена и остается таковой при охлаждении до  $T = T_U$ . При дальнейшем понижении температуры до  $T = T^* \ll T_U$  происходит постепенная “кристаллизация дефектов”, а при  $T < T^*$  система упорядочена (“кристаллизована”). При увеличении температуры от  $T < T^*$  до  $T_U$  система остается в неизменном кристаллизованном состоянии, а разупорядочение начинается лишь при  $T > T_U$ .

Такой сценарий возникновения и распада упорядоченного состояния объясняет температурный гистерезис  $\Delta_I(T)$  в  $\text{LuB}_{12}$ , в предположении, что  $T_U \approx 150$  К,  $T^* \approx 50$  К. При охлаждении до 150 К рост  $\Delta_I$  обусловлен уменьшением  $\nu_f$  атомов Lu, стохастически распределенных вокруг центров полостей  $\text{B}_{24}$ . При  $T \approx 150$  К имеет место кроссовер: при дальнейшем охлаждении сужение линии из-за уменьшения среднего значения ГЭП вследствие кристаллизации дефектов превалирует над ее уширением. Безгистерезисное поведение  $\Delta_I(T)$  при  $T < 50$  К обусловлено сформировавшимся упорядоченным – кристаллизованным – расположением атомов Lu.

При увеличении температуры выше 50 К  $\Delta_I(T)$  монотонно уменьшается из-за эффекта динамического сужения: кристаллизованное состояние сохраняется до  $\approx 150$  К, а увеличение разброса квадрупольных сдвигов вследствие разупорядочения при более высокой температуре проигрывает более сильной зависимости  $\nu_f(T)$  при  $T > 150$  К, о которой свидетельствует наклон кривой  $\Delta_I(T)$ , снятой при охлаждении в этом температурном интервале. Небольшая выпуклость на кривой  $\Delta_I(T)$  при отогреве между 100 и 200 К, по-видимому, обязана конкуренции этих двух механизмов.

**8.** Наблюдаемый при  $T \sim 150$  К экстремум  $\Delta_I(T)$  при охлаждении коррелирует с острым пиком в  $\mu\text{SR}$  исследованиях [17]. В работе [18] сообщается о том, что при этой же температуре длина свободного пробега фононов достигает предела Иоффе–Регеля, сравнимая с их длиной волны. В исследованиях коэффициента теплового расширения [19] сообщается

о переходах через “0” при температурах  $\sim 130$  К и  $\sim 40$  К: на вставке к рис. 3 видно, что  $\Delta_I(T)$  имеет явно выраженный минимум в районе 40 К.

9. Результаты проведенного ЯМР исследования  $\text{LuB}_{12}$  на ядрах  $^{175}\text{Lu}$  показали, что при комнатной температуре расположение атомов Lu в полостях  $\text{B}_{24}$  характеризуется состоянием структурного разупорядочения, которое благодаря КЭЯТ трансформируется при охлаждении ниже 150 К в более упорядоченную конфигурацию “кристаллизации дефектов” с меньшими смещениями относительно кубической позиции (0, 0, 0). Экстремумы при 150 и 40 К приблизительно соответствуют переходам через “0” коэффициентов теплового расширения. Таким образом, ЯМР подтверждает наличие “невных” переходов в додекаборидах, предположенных в работе [6]. Дана оценка “сверху” среднего значения величины квадратурной частоты  $^{175}\text{Lu}$   $\nu_Q < 58$  кГц.

**Финансирование работы.** Данная работа финансировалась за счет средств бюджета Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики твердого тела имени Ю. А. Осипьяна Российской академии наук. Работа Н. Е. Случанко поддержана грантом Российского научного фонда # 22-22-00243.

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

1. N. B. Bolotina, A. P. Dudka, O. N. Khrykina, V. N. Krasnorussky, N. Yu. Shitsevalova, V. B. Filipov, and N. E. Sluchanko, *J. Phys.: Condens. Matter* **30**, 265402 (2018).
2. N. Sluchanko, A. Bogach, N. Bolotina, V. Glushkov, S. Demishev, A. Dudka, V. Krasnorussky, O. Khrykina, K. Krasikov, V. Mironov, V. B. Filipov, and N. Shitsevalova, *Phys. Rev. B* **97**, 035150 (2018).
3. N. Sluchanko, A. Azarevich, A. Bogach, S. Demishev, K. Krasikov, V. Voronov, V. Filipov, N. Shitsevalova, and V. Glushkov, *Phys. Rev. B* **103**, 035117 (2021).
4. N. B. Bolotina, A. P. Dudka, O. N. Khrykina, V. V. Glushkov, A. N. Azarevich, V. N. Krasnorussky, S. Gabani, N. Yu. Shitsevalova, A. V. Dukhnenko, V. B. Filipov, and N. E. Sluchanko, *J. Phys. Chem. Solids* **129**, 434 (2019).
5. N. B. Bolotina, A. P. Dudka, O. N. Khrykina, and V. S. Mironov, *Crystal structure of dodecaborides: Complexity in simplicity*, in *Rare-Earth Borides*, ed. by D. S. Inosov, Jenny Stanford Publishing, Singapore (2021), ch. 3, p. 293.
6. O. N. Khrykina, A. P. Dudka, N. B. Bolotina, N. E. Sluchanko, and N. Yu. Shitsevalova, *Solid State Sci.* **107**, 106273 (2020).
7. B. Jäger, S. Paluch, O. Žogal, W. Wolf, P. Herzig, V. B. Filippov, N. Shitsevalova, and Y. Paderno, *J. Phys.: Condens. Matter* **18**, 2525 (2006).
8. R. K. Harris, E. D. Becker, S. M. Cabral de Menezes, R. Goodfellow, and P. Granger, *Pure Appl. Chem.* **73**, 1795 (2001).
9. N. Sluchanko, L. Bogomolov, V. Glushkov, S. Demishev, M. Ignatov, Eu. Khayrullin, N. Samarin, D. Sluchanko, A. Levchenko, N. Shitsevalova, and K. Flachbart, *Phys. Stat. Sol. (b)* **243**, R63 (2006).
10. F. Casanova and J. Perlo, *NMR in Inhomogeneous Fields*, in *Single-Sided NMR*, ed. by F. Casanova, J. Perlo, and B. Blümich, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2011), p. 11.
11. B. Nowak, O. Žogal, Z. Henkie, and M. B. Maple, *Solid State NMR* **36**, 209 (2009).
12. O. Žogal, R. Wawryk, M. Matusiak, and Z. Henkie, *J. Alloys Compd.* **587**, 190 (2014).
13. I. Solomon, *Phys. Rev.* **110**, 61 (1958).
14. P. P. Man, *J. Chem. Phys.* **106**, 3908 (1997).
15. A. Abragam, *The Principles of Nuclear Magnetism*, Oxford University Press, N.Y. (1961) [А. Абрагам, *Ядерный магнетизм*, изд. Иностран. л-ры, М. (1963)].
16. T. Kirpatrick and D. Thirumalai, *Random first-order phase transition theory of the structural glass transition*, in *Structural Glasses and Supercooled Liquids: Theory, Experiment, and Applications*, ed. by P. G. Wolynes and V. Lubchenko, John Wiley and Sons, Hoboken, New Jersey (2012), ch. 6, p. 223.
17. G. M. Kalvius, D. R. Noakes, N. Marcano, R. Wappling, F. Iga, and T. Takabatake, *Physica B* **326**, 398 (2003).
18. N. E. Sluchanko, A. N. Azarevich, A. V. Bogach, I. I. Vlasov, V. V. Glushkov, S. V. Demishev, A. A. Maksimov, I. I. Tartakovskii, E. V. Filatov, K. Flachbart, S. Gabani, V. B. Filippov, N. Yu. Shitsevalova, and V. V. Moshchalkov, *JETP* **113**(3), 468 (2011).
19. A. Czopnik, N. Shitsevalova, V. Pluzhnikov, A. Krivchikov, Yu. Paderno, and Y. Onuki, *J. Phys.: Condens. Matter* **17**, 5971 (2005).



# О двукратном преобразовании Мутара стационарного уравнения Шредингера с осевой симметрией

А. Г. Кудрявцев<sup>1)</sup>

Институт прикладной механики РАН, 125040 Москва, Россия

Поступила в редакцию 2 февраля 2024 г.

После переработки 2 февраля 2024 г.

Принята к публикации 28 февраля 2024 г.

Рассмотрено обобщенное преобразование Мутара стационарного осесимметричного уравнения Шредингера. Показано, что суперпозиция двух преобразований Мутара может привести к новым потенциалам для проблемы собственных значений. Примеры двумерных потенциалов и точных решений для стационарного осесимметричного уравнения Шредингера получены применением двукратного преобразования Мутара.

DOI: 10.31857/S1234567824070103, EDN: EUFBYY

**Введение.** Стационарное уравнение Шредингера  $(\Delta - u(x, y, z))Y(x, y, z) = 0$ , где  $\Delta$  – оператор Лапласа, представляет большой интерес, поскольку описывает различные физические явления. В случае  $u = -E + v(x, y, z)$  это уравнение описывает нерелятивистскую квантовую систему с энергией  $E$  [1], в случае  $u = -\omega^2/c(x, y, z)^2$  уравнение описывает акустическую волну с частотой  $\omega$  в неоднородной среде со скоростью звука  $c$  [2]. Многие физические среды обладают осевой симметрией. В случае осевой симметрии стационарное уравнение Шредингера в сферических координатах имеет вид

$$\left( \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{\sin(\theta)}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - u(r, \theta) \right) Y(r, \theta) = 0. \quad (1)$$

Важность существования точно решаемых задач квантовой механики бесспорна. Под точно решаемой моделью понимается модель, позволяющая получать точные решения в явном виде. Такие модели важны не только для описания физических систем, но и служат надежным начальным приближением при построении теории возмущений, а также полезны для тестирования численных алгоритмов. Поэтому поиск новых точных решений уравнения Шредингера является актуальной темой научных исследований, при этом используются различные методы решения [3–9].

Полезным инструментом для исследования одномерного уравнения Шредингера является преобразование Дарбу [10]. Преобразование Мутара [11, 12] является обобщением преобразования Дарбу для плоского двумерного уравнения Шредингера. В статьях

[13, 14] было рассмотрено нелокальное преобразование Дарбу двумерного стационарного уравнения Шредингера в декартовых координатах и была установлена его связь с преобразованием Мутара. В статье [15] рассмотрено нелокальное преобразование Дарбу стационарного осесимметричного уравнения Шредингера и показано, что частный случай нелокального преобразования Дарбу является обобщением преобразования Мутара. В настоящей статье рассмотрена задача на собственные значения для аксиально-симметричного уравнения Шредингера и получены новые двумерные потенциалы и точные решения в качестве применения обобщенного преобразования Мутара.

**2. Обобщенное преобразование Мутара в сферических координатах.** В результате перехода от цилиндрических к сферическим координатам формулы обобщенного преобразования Мутара из работы [15] принимают вид

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \tilde{Y}(r, \theta) Y_0(r, \theta) \sin(\theta) \right) = \\ & = \sin(\theta) r (Y_0(r, \theta))^2 \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{Y(r, \theta)}{Y_0(r, \theta)} \right), \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial r} \left( \tilde{Y}(r, \theta) Y_0(r, \theta) \sin(\theta) r \right) = \\ & - \sin(\theta) (Y_0(r, \theta))^2 \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{Y(r, \theta)}{Y_0(r, \theta)} \right), \end{aligned} \quad (3)$$

$$\tilde{u}(r, \theta) = u(r, \theta) - \quad (4)$$

$$- \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) \ln \left( \sin(\theta) (Y_0(r, \theta))^2 \right).$$

<sup>1)</sup>e-mail: kudryavtsev\_a\_g@mail.ru

Здесь  $Y_0$  и  $Y$  – решения уравнения (1) с начальным потенциалом  $u$ . Функция  $\tilde{Y}$ , определяемая как решение совместной системы уравнений (2) и (3), является решением уравнения (1) с новым потенциалом  $\tilde{u}$ .

Заметим, что  $Y = Y_0, \tilde{Y} = \frac{1}{Y_0 \sin(\theta)r}$  является простым примером решения уравнений (2) и (3).

В статьях [15, 16] были получены примеры двумерных потенциалов и точных решений стационарного осесимметричного уравнения Шредингера на основе формул обобщенного преобразования Мутара. Эти примеры показывают, что повторное применение обобщенного преобразования Мутара может привести к более интересным для физической интерпретации потенциалам, чем потенциалы, полученные однократным преобразованием. В частности, повторное применение обобщенного преобразования Мутара эффективно для получения потенциалов, не имеющих особенностей. Для двумерного плоского уравнения Шредингера в декартовых координатах в статье [17] было показано, что двукратное применение классического преобразования Мутара эффективно для получения несингулярных потенциалов. Аналогично, несингулярные потенциалы в цилиндрических координатах могут быть получены с помощью двукратного обобщенного преобразования Мутара [15, 16].

При изучении преобразований Мутара уравнения Шредингера с осевой симметрией было обнаружено еще одно интересное свойство двукратных преобразований [15], а именно, возможность получить одинаковое преобразование для собственных функций с разными собственными значениями. Дело в том, что для задачи на собственные значения  $u = -k^2 + v(r, \theta)$  в случае однократного применения преобразования Мутара (4), используя выбранную собственную функцию  $Y_0(r, \theta, k)$ , соответствующую собственному значению  $k$ , новый потенциал имеет вид  $\tilde{u} = -k^2 + \tilde{v}(r, \theta, k)$ . Поскольку  $\tilde{v}$  содержит зависимость от  $k$ , получаются разные преобразования для собственных функций с разными собственными значениями. Аналогично классическое преобразование Мутара в двумерном плоском случае приводит к различным преобразованиям для собственных функций с разными собственными значениями. В отличие от преобразования Мутара, преобразование Дарбу дает нам преобразования всех собственных функций. Это различие между двумерным случаем и одномерным случаем, по-видимому, отражается в известном факте о интегрируемости в двумерном случае только на выбранном уровне энергии (см., например, [18, 19]).

Рассмотрим  $u = -k^2$  и выберем собственную функцию  $Y_0 = \sin(kr \cos(\theta))$ . Из (4) получаем

$$\tilde{u} = -k^2 + 2 \frac{k^2}{(\sin(kr \cos(\theta)))^2} + \frac{1}{r^2 (\sin(\theta))^2}. \quad (5)$$

Это пример зависимости  $\tilde{v}$  от  $k$ . Чтобы избежать этой зависимости, мы используем двукратное преобразование Мутара. В результате перехода от цилиндрических к сферическим координатам формулы для суперпозиции двух обобщенных преобразований Мутара из работы [15] имеют вид

$$\tilde{u} = u(r, \theta) - 2 \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) \ln(F(r, \theta)), \quad (6)$$

$$\frac{\partial F}{\partial \theta} = \sin(\theta) r^2 \left( \frac{\partial Y_2}{\partial r} Y_1 - \frac{\partial Y_1}{\partial r} Y_2 \right), \quad (7)$$

$$\frac{\partial F}{\partial r} = -\sin(\theta) \left( \frac{\partial Y_2}{\partial \theta} Y_1 - \frac{\partial Y_1}{\partial \theta} Y_2 \right). \quad (8)$$

Здесь  $Y_1$  и  $Y_2$  – решения уравнения (1) с начальным потенциалом  $u$ .

Уравнения (7), (8) инвариантны относительно замены  $Y_1 \rightarrow Y_2, Y_2 \rightarrow Y_1, F \rightarrow -F$ , что отражает коммутативность обобщенных преобразований Мутара. Результат не зависит от порядка выбора функций  $Y_1, Y_2$  для преобразования. Отметим также, что  $F$  определяется с точностью до умножения на константу. Простые примеры решений уравнения (1) с потенциалом (6) можно получить по формулам  $\tilde{Y}_1 = Y_1 F^{-1}, \tilde{Y}_2 = Y_2 F^{-1}$ .

**3. Примеры потенциалов и точных решений.** Рассмотрим  $u = -k^2, Y_1 = \sin(kr \cos(\theta)), Y_2 = \cos(kr \cos(\theta))$ . Из уравнений (7), (8) получаем  $F = r^2 (\sin(\theta))^2 + C$ , где  $C$  – произвольная константа. Из формулы (6) получаем новый потенциал

$$\tilde{u} = -k^2 + 4 \frac{r^2 (\sin(\theta))^2 - C}{(r^2 (\sin(\theta))^2 + C)^2}. \quad (9)$$

Здесь  $\tilde{v}$  не зависит от  $k$ , и мы получили новую задачу на собственные значения. В качестве решения исходной задачи на собственные значения с  $u = -k^2$  мы будем рассматривать плоскую волну  $e^{ikr \cos(\theta)}$ . Проведя двукратное преобразование Мутара или воспользовавшись простой формулой  $Y_2 F^{-1} + i Y_1 F^{-1}$  мы получаем следующее решение уравнения (1) с потенциалом (9)

$$\frac{e^{ikr \cos(\theta)}}{r^2 (\sin(\theta))^2 + C}. \quad (10)$$

В качестве другого примера рассмотрим два решения уравнения (1) с потенциалом  $u = -k^2$

$$Y_1 = \frac{J_{p+1/2}(kr)P(p, \cos(\theta))}{\sqrt{r}}, \quad (11)$$

$$Y_2 = \frac{Y_{p+1/2}(kr)P(p, \cos(\theta))}{\sqrt{r}}, \quad (12)$$

где  $p$  – параметр,  $J_{p+1/2}, Y_{p+1/2}$  – функции Бесселя первого и второго рода,  $P$  – функция Лежандра первого рода. Из уравнений (7), (8) получаем  $F$ , зависящую только от  $\theta$

$$F_p(\theta) = - \int \sin(\theta) (P(p, \cos(\theta)))^2 d\theta. \quad (13)$$

Из формулы (6) получаем новый потенциал

$$\tilde{v}_p = -k^2 - 2 \frac{\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \ln(F_p(\theta))}{r^2}, \quad (14)$$

где  $\tilde{v}$  не зависит от  $k$ . Заметим, что  $\tilde{v} = \frac{f(\theta)}{r^2}$  имеет вид потенциала Калоджеро–Мозера. Проблема интегрируемости потенциалов типа Калоджеро–Мозера продолжает привлекать внимание исследователей в области математики и физики [20].

При целых неотрицательных значениях параметра  $p$  функцию  $F$  можно получить в явном виде. Так для  $p = 0, 1, 2$  мы имеем

$$F_0(\theta) = \cos(\theta) + C, F_1(\theta) = (\cos(\theta))^3 + C,$$

$$F_2(\theta) = \left(9(\cos(\theta))^4 - 10(\cos(\theta))^2 + 5\right) \cos(\theta) + C,$$

где произвольные константы  $C$  для каждой  $F_p$ , естественно, могут быть выбраны независимо.

Из (14) получаем соответствующие потенциалы

$$\tilde{u}_0 = -k^2 + 2 \frac{C \cos(\theta) + 1}{(F_0(\theta))^2 r^2}, \quad (15)$$

$$\tilde{u}_1 = -k^2 + 6 \frac{N_1(\theta)}{(F_1(\theta))^2 r^2}, \quad (16)$$

$$\tilde{u}_2 = -k^2 + 10 \frac{N_2(\theta)}{(F_2(\theta))^2 r^2}, \quad (17)$$

где

$$N_1(\theta) = \cos(\theta) \left( \left( 3(\cos(\theta))^2 - 2 \right) C + (\cos(\theta))^3 \right),$$

$$N_2(\theta) = \left( 45(\cos(\theta))^4 - 54(\cos(\theta))^2 + 13 \right) \cos(\theta) C + \left( 9(\cos(\theta))^4 + 72(\cos(\theta))^2 - 70 \right) (\cos(\theta))^4 + 5.$$

В качестве примеров точных решений задачи рассеяния с потенциалами (15)–(17) мы снова рассматриваем плоскую волну  $e^{ikr \cos(\theta)}$  для исходного  $u = -k^2$  и применяем двукратное преобразование Мутара с соответствующими  $Y_1$  и  $Y_2$  из формул (11) и (12). В результате получаем следующие точные решения

$$\tilde{Y}_0 = e^{ikr \cos(\theta)} \left( 1 + \frac{i}{kr F_0(\theta)} \right), \quad (18)$$

$$\tilde{Y}_1 = e^{ikr \cos(\theta)} \left( 1 + 3 \frac{\cos(\theta) (ikr \cos(\theta) - 1)}{k^2 r^2 F_1(\theta)} \right), \quad (19)$$

$$\tilde{Y}_2 = e^{ikr \cos(\theta)} \left( 1 + \frac{M(r, \theta, k)}{k^3 r^3 F_2(\theta)} \right), \quad (20)$$

где

$$M(r, \theta, k) = 5i \left( 3(\cos(\theta))^2 - 1 \right) \left( \left( 3(\cos(\theta))^2 - 1 \right) r^2 k^2 + 6ikr \cos(\theta) - 6 \right).$$

**4. Результаты и обсуждение.** Собственная функция задачи на собственные значения двумерного оператора Шредингера позволяет получить преобразование Мутара для потенциала. Однако результирующий потенциал зависит от собственного значения, соответствующего собственной функции. В статье показано, что в ряде случаев двукратное применение преобразования Мутара приводит к тому, что можно получить потенциал, не зависящий от собственных значений. Важно отметить, что преобразование Мутара для получения новых решений требует квадратур, поэтому получение собственных функций в явном аналитическом виде для нового потенциала не всегда возможно. Если для нового потенциала собственные функции получаются в явном виде, то мы можем говорить о новой разрешимой двумерной проблеме собственных значений. Здесь говорится, что задача разрешима, если она позволяет получить решения в явной аналитической форме. В этой статье приведены примеры новых разрешимых задач на собственные значения в случае оператора Шредингера с осевой симметрией. Для новой решаемой задачи можно попробовать еще раз построить двукратное преобразование Мутара. Нахождение всех разрешимых задач на собственные значения оператора Шредингера, которые можно получить с помощью двукратного преобразования Мутара, остается открытой проблемой.

**Финансирование работы.** Данная работа финансировалась за счет средств бюджета института. Никаких дополнительных грантов на проведение или руководство данным конкретным исследованием получено не было.

**Конфликт интересов.** У автора нет конфлик-  
тов интересов.

1. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics: Nonrelativistic Theory*, Pergamon Press, Oxford (1977).
2. P. M. Morse and K. U. Ingard, *Theoretical Acoustics*, McGraw-Hill, N.Y. (1968).
3. L. Infeld and T. E. Hull, *Rev. Mod. Phys.* **23**, 21 (1951).
4. A. F. Nikiforov and V. B. Uvarov, *Special Functions of Mathematical Physics. A Unified Introduction With Applications*, Basel–Boston, Birkhauser Verlag (1988).
5. Fred Cooper, Avinash Khare, and Uday Sukhatme, *Phys. Rep.* **251**, 267 (1995).
6. A. A. Andrianov and M. V. Ioffe, *J. Phys. A: Math. Theor.* **45**, 503001 (2012).
7. D. J. Fernandez, *Trends in Supersymmetric Quantum Mechanics* in: *Integrability, Supersymmetry and Coherent States. CRM Series in Mathematical Physics*, ed. by Ş. Kuru, J. Negro, and L. Nieto, Springer, Cham (2019).
8. Sanjana Bhatia, C. N. Kumar, and A. Nath, *Phys. Lett. A* **492**, 129228 (2023).
9. G. Gordillo-Núñez, R. Alvarez-Nodarse, and N. R. Quintero, *Physica D: Nonlinear Phenomena* **458**, 134008 (2024).
10. V. B. Matveev and M. A. Salle, *Darboux Transformations and Solitons*, Springer, Berlin (1991).
11. T. Moutard, *J. Ecole Polyt.* **45**, 1 (1878).
12. C. Athorne and J. J. C. Nimmo, *Inverse Problems* **7**, 809 (1991).
13. A. G. Kudryavtsev, *Phys. Lett. A* **377**, 2477 (2013).
14. A. G. Kudryavtsev, *Theor. Math. Phys.* **187**(1), 455 (2016).
15. A. G. Kudryavtsev, *JETP Lett.* **111**(2), 126 (2020).
16. A. G. Kudryavtsev, *JETP Lett.* **113**(6), 409 (2021).
17. I. A. Taimanov and S. P. Tsarev, *Theor. Math. Phys.* **157**(2), 1525 (2008).
18. A. P. Veselov and S. P. Novikov, *Dokl. Akad. Nauk SSSR* **279**(4), 784 (1984) [*Soviet Math. Dokl.* **30**(3), 705 (1984)].
19. A. V. Ilina, I. M. Krichever, and N. A. Nekrasov, *Funct. Anal. Its. Appl.* **53**, 23 (2019).
20. Y. Berest and O. Chalykh, *Commun. Math. Phys.* **400**, 133 (2023).

# Реализация квантового генератора случайных чисел: экстракция доказуемо случайных битовых последовательностей из коррелированных марковских цепочек

К. А. Балыгин<sup>+\*</sup>, С. П. Кулик<sup>\*</sup>, С. Н. Молотков<sup>×°1)</sup>

<sup>+</sup>Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, 123182 Москва, Россия

<sup>\*</sup>Центр квантовых технологий, МГУ имени М. В. Ломоносова, 119899 Москва, Россия

<sup>×</sup>Академия криптографии Российской Федерации, 119331 Москва, Россия

<sup>°</sup>Институт физики твердого тела имени Ю. А. Осипьяна РАН, 142432 Черноголовка, Россия

Поступила в редакцию 4 марта 2024 г.

После переработки 5 марта 2024 г.

Принята к публикации 5 марта 2024 г.

Представлена экспериментальная реализация квантового генератора случайных чисел. Впервые экспериментально реализован новый метод экстракции *доказуемо случайных битовых последовательностей* из коррелированных последовательностей фотоотсчетов – марковских цепей. *Достигнута скорость генерации 0 и 1 в 154.5 Мбит/с.* Обсуждаются также фундаментальные ограничения Природы на достижение истинной – идеальной случайности.

DOI: 10.31857/S1234567824070115, EDN: CHMAKN

**Введение.** В криптографических системах используются случайные числа, которые получаются как результат работы *физического генератора случайных чисел*, который является неотъемлемой частью системы и качество которого в значительной степени определяет стойкость системы.

Истинная случайность существует только в квантовой области, в том смысле, что результат измерения над квантовой системой каждый раз приготовленной в одних и тех же начальных условиях является принципиально непредсказуемым [1, 2].

Реализация физического генератора случайных чисел включает следующие стадии:

1. Выбор физической системы, измерения над которой дают первичную случайную последовательность.
2. Экстракция случайной битовой последовательности 0 и 1 из первичной последовательности.

Методы экстракции случайных последовательностей 0 и 1 из результатов измерений можно разделить на два класса: 1) вероятностные экстракторы, например, [3, 4]; 2) детерминистические экстракторы [2, 5–14].

Подходящим источником квантовой случайности, с точки зрения экспериментальной реализации, является акт поглощения фотонов – фотоотсчеты. Поскольку строго однофотонный источник отсутствует на сегодняшний день, то приходится использовать

квазиднофотонные состояния света – сильно ослабленное когерентное излучение лазера.

*Если можно было бы обеспечить независимость последовательных во времени фотоотсчетов, то можно было бы использовать эффективные способы экстракции доказуемо истинно случайных последовательностей 0 и 1 [2]. Под истинно случайными последовательностями понимаются такие последовательности 0 и 1, в которых 0 и 1 независимы в каждой позиции, и вероятность  $P(0) = P(1) = \frac{1}{2}$ . Однако существуют фундаментальные ограничения на скорость спада корреляций между последовательными во времени измерениями. Любой случайный физический процесс, квантовый или классический, имеет спектр на положительной полуоси частот. В этом случае степень спада корреляций случайной величины в разнесенные моменты времени, строго говоря, не может быть даже строго экспоненциальной, что диктуется фундаментальной теоремой Винера–Пэли [15]<sup>2)</sup>.*

<sup>2)</sup>Заметим также, что теорема Винера–Пэли [15] приводит еще к одному фундаментальному последствию, а именно, процесс спонтанного распада (например,  $\alpha$ -распад) не может быть экспоненциальным по времени – отклоняется от экспоненциального закона на малых и больших временах (см., например, детали в [16]). Отклонение от экспоненциального закона приводит к тому, что статистика отсчетов любого физического процесса *принципиально не может быть строго пуассоновской*. Процессы  $\alpha$ -распада многие годы назад использовались для генерации случайных чисел, хотя не получили широкого применения из-за малой скорости и технического неудобства

<sup>1)</sup>e-mail: sergei.molotkov@gmail.com

Это означает, что извлекаемые из случайного процесса в разные моменты времени результаты измерений, строго говоря, оказываются коррелированными (зависимыми). Формально независимыми измерения становятся только при разнесении моментов измерения во времени на бесконечный интервал.

Физический сигнал – результат измерений  $x(t)$  имеет спектр на положительной полуоси частот  $\omega$ , т.е.  $\omega \in [0, \infty)$ , что приводит к фундаментальным ограничениям на скорость спада корреляционной функции  $\mathcal{K}(\tau) = \overline{x(t)x(t+\tau)}$  от времени. Согласно [15], для любой квадратично интегрируемой функции по времени (фактически имеющей конечную энергию), следующий интеграл должен сходиться (быть меньше бесконечности)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{|\log(\mathcal{K}(\tau))|}{1+\tau^2} d\tau < \infty.$$

Экспоненциальное спадание  $\mathcal{K}(\tau) \propto e^{-\tau}$  приводило бы к логарифмической расходимости интеграла. Поскольку упомянутые ограничения на независимость измерений в последовательные моменты времени являются фундаментальным запретом Природы, то их принципиально невозможно обойти. Максимум на что можно рассчитывать, так это на уменьшение корреляций между последовательными измерениями до желаемого уровня путем увеличения интервала времени  $T$  между измерениями. Формально лишь при  $T \rightarrow \infty$  измерения становятся независимыми.

Каждый текущий акт фотоотсчета зависит от последовательности отсчетов на предыдущих тактах. В эксперименте невозможно считать, что “глубина” предыстории является бесконечной, но естественно выбрать ее такой, чтобы зависимость от предыстории невозможно было заметить за время работы квантового генератора случайных чисел.

Таким образом, принципиально невозможно экспериментально “дотянуться” до идеальной случайности за конечное время.

Однако даже, в приближении конечной глубины корреляций между измерениями, крайне сложно

реализации. По этой причине использование таких физических процессов для создания генераторов случайных чисел требует особой осторожности. Кроме того, в работе [17] было показано, что теорема Винера–Пэли вместе с принципом тождественности частиц приводит к фундаментальному пределу скорости генерации истинно случайных последовательностей 0 и 1. В квантовой области спектр гамильтониана устойчивой системы ограничен снизу, что, кстати, приводит к тому, что не существует эрмитового оператора времени в квантовой механике (время является параметром).

доказать, что экстрагируется истинно случайная последовательность 0 и 1.

Для дальнейшего изложения, имеет смысл кратко, обсудить методы экстракции случайности. Вкратце первый метод на базе вероятностных экстракторов основан на следующих предположениях. Пусть имеется распределение вероятностей  $P(x_1, x_2, \dots, x_n)$  исходов измерений  $(x_1, x_2, \dots, x_n)$ . Далее из некоторых модельных предположений оценивается величина, так называемой,  $\min$ -энтропии –  $H_{\min} = -\max_{(x_1, x_2, \dots, x_n)} \log(P(x_1, x_2, \dots, x_n))$ . Пусть оценки  $\min$ -энтропии дают  $H_{\min} \geq k$ , тогда теоретически можно получить не более  $k$  близких к случайным бит 0 и 1. Для экстракции случайных 0 и 1 из первичной последовательности измерений  $(x_1, x_2, \dots, x_n)$  используется сжатие – хэширование первичной последовательности при помощи хэш-функций – экстракторов. Более формально сжатие является отображением исходной последовательности длины  $n$   $\{0, 1\}^n$  в последовательность меньшей длины  $\{0, 1\}^\ell$  ( $\ell < n$ ). При этом сама хэш-функция является случайной величиной. Иначе говоря, случайный выбор хэш-функции из некоторого множества функций требует *дополнительной случайности – битовой строки 0 и 1*. После сжатия получается не истинно случайная строка 0 и 1, а битовая строка  $\varepsilon$  с распределением  $P(x)$  ( $x \in \{0, 1\}^\ell$ ), близкая  $\kappa$  истинно случайной с распределением  $P_U(x) = \frac{1}{2^\ell}$

$$\sum_{x \in \{0, 1\}^\ell} |P(x) - \frac{1}{2^\ell}| < \varepsilon.$$

Главная проблема в данном подходе состоит в том, что оценка  $\min$ -энтропии требует трудно контролируемых предположений о свойствах первичной последовательности результатов физических измерений. Аккуратно можно оценить  $\min$ -энтропию только для независимых результатов измерений, т.е. когда функция распределения распадается на произведение  $P(x_1, x_2, \dots, x_n) = P(x_1)P(x_2) \dots P(x_n)$ . Вторым важным моментом состоит в том, что случайный выбор хэш-функции требует *дополнительной случайности*.

Возникает замкнутый круг – для экстракции случайности нужна *дополнительная случайность*.

Было предложено многократное использование случайности при выборе хэш-функции [3, 4]. Однако повторное использование случайности при выборе хэш-функции приводит к тому, что выходная последовательность 0 и 1 начинает все больше отклоняться от равновероятного распределения  $P_U(x)$ .

Детерминистические экстракторы не требуют *дополнительной случайности*.

Поскольку при описании невозможно учесть зависимость текущего фотоотсчета от предыстории на бесконечное предыдущее время, то приходится ограничивать “глубину” – предысторию корреляций конечной величиной. Поэтому будем считать, что текущий фотоотсчет зависит от предыдущих исходов измерений на некоторую глубину. Данный параметр является свободным, и все выводы останутся справедливыми при любой конечной глубине корреляций. Адекватной моделью является марковская цепь случайных событий – последовательность фотоотсчетов или их отсутствие –  $\{*, \square\}$  в каждом такте. Вероятность события в каждом такте  $*$  или  $\square$  зависит от предыдущих тактов на глубину  $r$  ( $r$  выбирается свободным.)

Ранее было показано [18], что в предположении конечной глубины корреляций, метод, используемый ниже, выдает на выходе действительно истинно случайную последовательность 0 и 1 – любая позиция в выходной последовательности 0 и 1 реализуется строго с вероятностью  $\frac{1}{2}$ , и каждая позиция независима от остальных. Данное принципиальное утверждение – доказуемая случайность имеет место при любой конечной глубине корреляций в марковской цепи. Истинная случайность – слишком “сильный и сложный” информационный ресурс, что даже в рамках приближений к реальной ситуации, доказательство истинной случайности является далеко нетривиальной задачей [14, 18].

Ниже, для самодостаточности изложения, приведем сначала метод экстракции доказуемо случайных последовательностей 0 и 1 из независимых последовательностей (см. детали в [2, 18]), затем применим метод экстракции доказуемо случайных последовательностей для марковских цепей (см. детали в [14, 18]) в экспериментальной реализации квантового генератора случайных чисел.

**Экстракция случайных битовых последовательностей из бернуллиевских последовательностей.** Общая идея доказательства экстракции доказуемо случайных 0 и 1 из марковской цепи сводится к разбиению марковской цепи на классы эквивалентности одинаково вероятных последователь-

ностей, к которым применяется метод нумерации Бабкина [19]. Подробные доказательства приведены в работе [18], ниже мы лишь упомянем необходимые моменты. Начнем с независимых бернуллиевских последовательностей. Экспериментальная реализация квантового генератора случайных чисел, в предположении независимых измерений в первичных последовательностях, была сделана ранее [20–23].

Пусть имеется источник независимых фотоотсчетов – бернуллиевская последовательность испытаний. Экстракция истинно случайных последовательностей 0 и 1 из независимых бернуллиевских последовательностей происходит в два этапа.

1) Первый этап: нумерация “на ходу” по мере возникновения бернуллиевской последовательности – присвоение номера по методу Бабкина [19] в классе эквивалентности последовательностей, имеющих одинаковую вероятность.

2) Второй этап: по номеру последовательности формируется блок истинно случайных 0 и 1, последовательные блоки конкатинируются в выходную случайную последовательность.

Пусть имеется источник, который порождает первичную последовательность – символы из бинарного алфавита  $A = \{*, \square\}$ . Рассмотрим блок длиной  $n$ , где имеется  $k$  символов  $*$ . Всего таких блоков  $C_n^k$ . Пусть  $k$  символов  $*$  встретились на местах  $(i_1, i_2, \dots, i_k)$ ,  $1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_k \leq n$ . Присвоим блоку номер

$$\begin{aligned} \text{Num}(i_1, i_2, \dots, i_k) &= \\ &= C_{i_1-1}^1 + C_{i_2-1}^2 + \dots + C_{i_{k-1}-1}^{k-1} + C_{i_k-1}^k, \end{aligned}$$

где полагается  $C_j^i = 0$ , если  $j < i$ . Данное равенство дает метод нумерации В.Ф. Бабкина [19], который является “жемчужиной” арифметического кодирования без потерь.

Извлечение блока  $\{\varepsilon\}$  случайных 0 и 1 происходит из двоичного представления  $(\varepsilon_{r_m+1}, \varepsilon_{r_m}, \varepsilon_{r_m-1}, \dots, \varepsilon_1, \varepsilon_0)$  номера  $\text{Num}(i_1, i_2, \dots, i_k)$ , и производится по-разному, в зависимости от того, в каком диапазоне чисел между 0 и  $C_n^k - 1$  лежит номер  $\text{Num}(i_1, i_2, \dots, i_k)$  текущего блока. А именно:

номер	блок $\{\varepsilon\}$ случайных 0 и 1
$0 \leq \text{Num}(i_1, i_2, \dots, i_k) \leq 2^{r_0} - 1$	$\varepsilon_{r_0-1}, \dots, \varepsilon_0$
$2^{r_0} \leq \text{Num}(i_1, i_2, \dots, i_k) \leq 2^{r_0} + 2^{r_1} - 1$	$\varepsilon_{r_1-1}, \dots, \varepsilon_0$
$2^{r_0} + 2^{r_1} \leq \text{Num}(i_1, i_2, \dots, i_k) \leq 2^{r_0} + 2^{r_1} + 2^{r_2} - 1$	$\varepsilon_{r_2-1}, \dots, \varepsilon_0$
...	...
$2^{r_0} + \dots + 2^{r_m} \leq \text{Num}(i_1, i_2, \dots, i_k) \leq 2^{r_0} + \dots + 2^{r_m} - 1$	$\varepsilon_{r_m-1}, \dots, \varepsilon_0$

Пронумеруем строки (неравенства) номерами  $0, \dots, j, \dots, m$ . В  $j$  строке – подклассе – содержится  $2^{r_j}$  различных номеров  $\text{Num}(i_1, i_2, \dots, i_k)$ , которым однозначно соответствуют двоичные векторы из пространства  $\{0, 1\}^{r_j}$ . Тогда, по каждому текущему номеру  $\text{Num}(i_1, i_2, \dots, i_k)$  на выход выдается соответствующий ему блок  $\{\varepsilon\}$ , состоящий из 0 и 1.

**Цепь Маркова.** Ниже кратко для самодостаточности изложения приведем необходимые сведения о цепях Маркова, поскольку полные доказательства являются довольно объемными (см. полные доказательства и детали в [18]).

В реальной ситуации имеется зависимость текущего состояния (\* – фотоотсчет,  $\square$  – отсутствие фотоотсчета в текущем такте) от предыдущих состояний. Будем считать, что такая зависимость распространяется на глубину  $r$  – предыдущих тактов измерений. Данная ситуация описывается цепью Маркова – текущее событие зависит от предыдущих, что задается переходной (условной) вероятностью. Наша цель – эффективно сгенерировать случайные биты из простой однородной цепи Маркова с неизвестными переходными вероятностями. Входная последовательность – цепь Маркова

$$X = x_1 x_2 \dots x_N,$$

$x_i \in \{s_1, s_2, \dots, s_n\}$  – состояния цепи, здесь  $n$  обозначает количество состояний цепи Маркова.

**Сведение цепи Маркова с глубиной  $r$  к цепи с глубиной  $r = 1$ .** Рассматриваемые ниже алгоритмы извлечения случайных бит справедливы для простых однородных цепей Маркова, т.е. стационарных (с неменяющейся матрицей переходных вероятностей) и имеющих порядок  $r = 1$ , где матрица переходных вероятностей задается в виде  $P(s_j | s_i)$ ,  $s_i, s_j \in \{s_1, \dots, s_n\}$ , поэтому требуется свести цепь Маркова с глубиной  $r > 1$  к простой цепи с  $r = 1$ . Это делается путем увеличения размерности состояний цепи. Вероятность произвольной последовательности символов  $X_N = x_1 x_2 \dots x_N$  определяется как

$$P(X_N) = P(x_1) \prod_{i=1}^{N-1} P(x_{i+1} | x_i).$$

На практике, при построении квантового генератора случайных чисел имеем символы из бинарного алфавита  $A = \{*, \square\} = \{0, 1\}$  и некоторый произвольный порядок  $r > 1$ . В этом случае цепь Маркова задается начальным распределением  $P(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_r)$  с матрицей переходных вероятностей  $P(\varepsilon_{r+1} | \varepsilon_1, \dots, \varepsilon_r)$ ,  $\varepsilon_i \in \{0, 1\}$ . Вероятность траектории – первичной последовательности, есть

$$X_N = \varepsilon_1 \varepsilon_2 \dots \varepsilon_N, \varepsilon_i \in \{0, 1\}$$

$$P(X_N) = P(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_r) \prod_{i=1}^{N-r} P(\varepsilon_{i+r} | \varepsilon_i, \dots, \varepsilon_{i+r-1}).$$

Перейти к простой цепи Маркова с глубиной  $r = 1$  можно путем укрупнения алфавита. Введем новый алфавит  $A' = \{s_1, \dots, s_n\} = 0\dots 0, \dots, 1\dots 1 = 2^r$ , объединяя соседние  $r$  символов в траектории  $X_N = \varepsilon_1 \varepsilon_2 \dots \varepsilon_N$  с зацеплением на 1 позицию в один символ. Тогда новые символы  $X_{N-r} = x_1 x_2 \dots x_{N-r}$  будут зависеть только от одного своего предшественника, имеем

$$\begin{aligned} P(\varepsilon_{i+r} | \varepsilon_i, \dots, \varepsilon_{i+r-1}) &= \\ = P(\varepsilon_{i+1}, \dots, \varepsilon_{i+r-1} \varepsilon_{i+r} | \varepsilon_i, \dots, \varepsilon_{i+r-1}) &= \\ = P(x_{i+1} | x_i). \end{aligned}$$

**Выходные последовательности из марковской цепи.** Для построения метода экстракции случайных 0 и 1 необходимо ввести разбиение на классы эквивалентности на множестве последовательностей с одинаковой вероятностью [2, 18]. Введем понятие выходных последовательностей [18], имеем

$$X_N = x_1 x_2 \dots x_N, \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \pi(X_N) &= \{\pi_1(X_N), \pi_2(X_N), \dots, \pi_M(X_N)\}, \\ \pi_i(X_N) &= \{x_j : x(j-1) = s_i\}, \end{aligned} \quad (2)$$

т.е. это множество последовательностей  $\pi_i(X_N) - x$ , где выходной  $\pi_i(X_N)$ -й блок представляет собой подпоследовательность символов, следующих за  $s_i$ . Последовательность однозначно задается своим первым элементом и набором выходных последовательностей (блоков), иными словами, существует взаимно-однозначное отображение между  $X_N$  и парой  $(x_1, \pi(X_N))$ .

*Иллюстративные примеры.* 1) Приведем пример формирования выходных блоков  $\pi(X_N)$  из марковской цепи с  $r = 1$ , для бинарного алфавита, пусть

$$X_N = x_1, \dots, x_N = 010010111000101000110110001, \quad (3)$$

сформируем блок  $\pi_i(X_N)$ , отметим состояния, которые следуют за 0 и за 1, получаем

$$\pi_0(X_N) \quad 0 \rightarrow = 101100110011001, \quad (4)$$

$$\pi_1(X_N) \quad 1 \rightarrow = 0011000101000. \quad (5)$$

Суммарное число бит  $N - 1$ , поскольку первый 0 никуда не входит.



2) Теперь, пусть марковская цепь с предысторией на глубину 2 шага,  $r = 2$ , имеем состояния цепи  $s_i$  ( $i = 1, 2, 3, 4$ ),

$$s_1 = 00, \quad s_2 = 01, \quad s_3 = 10, \quad s_4 = 11. \tag{6}$$

Укрупнение алфавита приводит к последовательности

$$\begin{aligned} &010010111000101000110110001 = \\ &= 01.10.00.01.10.01.11.11.10.00.00.01.10.01.10.00.00.01.11.10.01.11.10.00.00.01 = \\ &= 2.3.1.2.3.2.4.4.3.1.1.2.3.2.3.1.1.2.4.3.2.4.3.1.1.2. \end{aligned} \tag{7}$$

Последняя последовательность представляет собой простую однородную цепь Маркова, имеем

$$\pi_1(X_N) \quad 1 \rightarrow 2.1.2.1.2.1.2, \tag{8}$$

$$\pi_2(X_N) \quad 2 \rightarrow 3.3.4.3.3.4.4, \tag{9}$$

$$\pi_3(X_N) \quad 3 \rightarrow 1.2.1.2.1.2.1, \tag{10}$$

$$\pi_4(X_N) \quad 4 \rightarrow 4.3.3.3. \tag{11}$$

Принципиальный вопрос сводится к следующему. Какие перестановки в блоках  $\pi_i(X_N)$  допустимы? Какие перестановки отвечают существующим цепям Маркова и сохраняют вероятность переставленной последовательности. Было показано [14, 18], что, если имеются две марковские цепи  $X_N$  и  $X'_N$ , которые начинаются с одинакового элемента  $s_1$  и заканчиваются элементом  $s_\chi$ , то две марковские цепочки с  $\pi(X_N)$  и  $\pi'(X'_N)$  входят в один класс эквивалентности и имеют одинаковую вероятность, если имеет место

$$\pi(X_N) = \{\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_\chi, \dots, \pi_N\}, \quad \pi'(X'_N) = \{\Lambda_1, \Lambda_2, \dots, \Lambda_\chi, \dots, \Lambda_N\}, \tag{12}$$

$$\pi_i \equiv \Lambda, \quad i \neq \chi \quad \text{перестановка с фиксированным последним элементом } \pi_i,$$

$$\pi_i \equiv \Lambda, \quad i = \chi, \quad \text{любые перестановки } \pi_i.$$

Обратно, если имеют место перестановки в  $\pi(X_N)$ , то существует марковская цепь с той же вероятностью. Данное свойство позволяет разбить все марковские цепочки на классы эквивалентности одинаково вероятных последовательностей. Далее из классов эквивалентности происходит экстракция случайных последовательностей 0 и 1.

**Экстракция “на ходу”.** В этом разделе приведем метод экстракции случайных 0 и 1 “на ходу” (см. детали в [18]).

*Входные данные:*

Последовательность  $X = x_1x_2\dots x_N$  – цепь Маркова, где  $x_i \in S = s_1, s_2, \dots, s_n$ .

*Параметры:*

Размер окна  $\varpi$ . Окно необходимо, чтобы вырезать последовательные блоки из  $\pi_i(X)$  размером  $\varpi$ . Ширина окна  $\varpi$  выбирается при реализации.

*Выход алгоритма:*

Последовательность или поток истинно случайных 0 и 1.

Данный алгоритм *распараллеливает* поступающие состояния траектории цепи Маркова на выходные последовательности  $\pi_1(X), \dots, \pi_n(X)$ , добавляя следующий  $s_j$  в последовательность  $\pi_i(X)$ , *только* если перед  $s_j$  было состояние  $s_i$ .

Пусть в последовательности  $\pi_i(X)$  набрался текущий блок  $F_{ik}$ ,  $k = 1, 2, \dots$ , размера  $\varpi$ , тогда он:

- сразу отправляется для преобразования в биты – 0 и 1, если последний элемент в  $F_{ik}$  как раз равен  $s_i$ ;
- если последний элемент в  $F_{ik}$  не равен  $s_i$ , то блок  $F_{ik}$  ждет отправки на обработку до тех пор, пока в цепи Маркова не появится  $s_i$ ;
- блок  $F_{ik}$  вообще не отправляется на обработку, если ему не удалось дождаться появления  $s_i$ .

В этом смысле мы можем говорить, что *наполненные* блоки в *параллельных* выходных последовательностях  $\pi_1(X), \dots, \pi_n(X)$  *становятся в очередь* на обработку. Их *считывание* данным алгоритмом не совпадает с *естественно-временным* появлением блоков.

Как было показано в [18], такой порядок считывания блоков, какой задается алгоритмом для данной траектории цепи Маркова, *сохраняется также и при считывании блоков любой траектории цепи Маркова в классе эквивалентности S*, что открывает *прямой путь к равновероятности выходной двоичной последовательности на выходе алгоритма Бабкина по аналогии с независимым источником.*

Приведем пример. Пусть  $N = 29, n = 2, \varpi = 3$ .

$$X = s_1 s_2 s_2 s_1 s_1 s_2 s_2 s_1 s_1 s_2 s_2 s_1 s_1 s_2 s_2 s_1 s_1 s_2 s_2 s_1 s_1 s_2 s_2 s_1 s_1 s_2 s_2 s_1 s_1$$

$$\pi_1(X) = E_1 = \overbrace{s_2 - -s_1 s_2}^{F_{11}} - - \overbrace{s_1 s_2 - -s_1}^{F_{12}} s_2 - -s_1 s_2 - - \overbrace{s_1 s_2 - -s_1}^{F_{13}} s_2 - -s_1 \overbrace{s_2 - -s_1}^{E_1} - -s_1,$$

$$\pi_2(X) = E_2 = - \overbrace{s_2 s_1 - -s_2}^{F_{21}} s_1 - -s_2 s_1 - - \overbrace{s_2 s_1 - -s_2}^{F_{23}} s_1 - -s_2 s_1 - - \overbrace{s_2 s_1 - -s_2}^{F_{24}} s_1 - - \overbrace{s_2 s_1}^{E_2} - .$$

Порядок считывания блоков алгоритмом

$$F_{21} \dots F_{11} \dots F_{12} \dots F_{22} \dots F_{23} \dots F_{13} \dots F_{14} \dots F_{24}.$$

Естественного-временного порядка считывания блоков

$$F_{11} \dots F_{21} \dots F_{22} \dots F_{12} \dots F_{13} \dots F_{23} \dots F_{24} \dots F_{14}.$$

Как было доказано в [18], алгоритм выдает истинно случайную последовательность 0 и 1 “на ходу” из марковской цепи.

Разобьем все возможные последовательности из  $s_1, s_2, \dots, s_n^N$  на классы эквивалентности, имеющих одинаковую вероятность. Рассмотрим последовательность  $X$  и включим  $X'$  в класс  $S$ , если:

- 1)  $x_1 = x'_1$  и  $x_N = x'_N$  – начало и конец совпадают,
- 2) для всех  $1 \leq i \leq n$

$$\pi_i(X) = F_{i1} F_{i2} \dots F_{im_i} E_i, \tag{13}$$

$$\pi_i(X') = F'_{i1} F'_{i2} \dots F'_{im_i} E_i,$$

где  $F_{ij}$  и  $F'_{ij}$  – блоки, используемые для генерации выходных данных,

- 3) для всех  $i, j$  имеем  $F_{ij} \equiv F'_{ij}$  – полная перестановка.

Не обрабатываемые части  $E_i$  для последовательностей  $X$  и  $X'$  совпадают. Кроме этого, как следует из разделов выше, последовательности в классе  $S$  имеют одинаковую вероятность.

В выходных последовательностях  $\pi_i(X) = F_{i1} F_{i2} \dots F_{im_i} E_i, 1 \leq i \leq n$ , последовательность блоков  $F_{i1}, F_{i2}, \dots, F_{im_i}$  определяет порядок, в котором эти блоки отправляются на обработку по алгоритму Бабкина для экстракции случайных 0 и 1. В то же время, глобальный порядок следования блоков

$$F_{11}, F_{i2}, \dots, F_{1m_1}, F_{21}, F_{22}, \dots, F_{2m_2}, \dots, F_{n1}, F_{n2}, \dots, F_{nm_n} \tag{14}$$

в реальном времени появления состояний цепи Маркова может быть весьма произвольным, но строго заданной исходной цепью Маркова  $X = x_1 x_2 \dots x_N$ .

Глобальный порядок следования блоков для всех траекторий  $X' = x'_1 x'_2 \dots x'_N$  из класса  $S$  сохраняется и равен

$$F'_{11}, F'_{12}, \dots, F'_{1m_1}, F'_{21}, F'_{22}, \dots, F'_{2m_2}, \dots, F'_{n1}, F'_{n2}, \dots, F'_{nm_n}.$$

Далее, как и в случае независимого источника, блоки  $F_{ij}$  по мере появления обрабатываются алгоритмом Бабкина. Выход из каждого блока  $\Psi(F_{ij})$  есть блок истинно случайных 0 и 1. Данные блоки последовательно конкатенируются – последовательно соединяются, в данном примере, имеем

$$\Psi(F_{11}) \parallel \dots \parallel \Psi(F_{nm_n}) = Y_{11} \parallel \dots \parallel Y_{nm_n} = Y.$$

Как было показано в [18], с использованием одинаковой вероятности траекторий цепи Маркова в классах эквивалентности, что выходные последовательности при любой длине  $\ell$  содержат всевозможные комбинации 0 и 1

$$\overbrace{(000\dots000)}^{\ell}, \overbrace{(000\dots001)}^{\ell}, \dots, \overbrace{(111\dots111)}^{\ell},$$

и все такие последовательности имеют одинаковую вероятность  $2^{-\ell}$ , независимо от глубины корреляций. В этом случае отдельные биты, как случайные величины, являются независимыми и равновероятными, т.е. являются истинно случайными.

**Экспериментальная реализация квантового генератора случайных чисел.** При реализации требуется совместить два взаимно противоречивых требования. 1) Для достижения большой скорости генерации случайных чисел требуется увеличивать тактовую частоту, что приводит к корреляциям между последовательными результатами измерений из-за того, что детектор не готов к регистрации в следующем такте – имеет “мертвое” время. 2) Для достижения однофотонного режима (точнее квазиоднофотонного) требуется уменьшать интенсивность излучения – среднее число фотонов в каждом такте, что приводит к снижению темпа фотоотсчетов, и, соответственно, скорости генерации случайных чисел.

Вторая проблема решается использованием не отдельного детектора, а матрицы детекторов – SiPM матрицы (Silicon Photo Multiplier), содержащей большое число детекторов. При этом вероятность регистрации фотонов пропорциональна числу пикселей в SiPM, что позволяет снизить среднее число фотонов. Первая проблема также решается, вероятность того, что фотон попадет в детектор, который сработал на предыдущем такте, и еще не готов к регистрации, обратно пропорциональна числу пикселей.

Таким образом, использование матрицы SiPM решает упомянутые проблемы. Функциональная схема генератора представлена на рис. 1.

В качестве детектора был выбран сенсор SiPM (EQR15-22-1313D-S, Китай), имеющий 4 отдельных матрицы SiPM в одном корпусе. Площадь отдельного элемента составляла  $S_p = 1.3 \times 1.3 \text{ мм}^2$ , с числом пикселей  $N_p = 4444 \text{ 1/мм}^2$ . Квантовая эффективность  $\eta$  отдельного детектора составляла  $\eta \approx 15\%$  на длине волны  $0.635 \text{ мкм}$ . Характерный темп темновых отсчетов матрицы SiPM  $250 \text{ КГц}$ . Источником излучения являлся светодиод с рабочей длиной волны излучения  $\lambda = 635 \text{ мкм}$ . Для обработки использовалась (ПЛИС) FPGA фирмы MAX 10 (Intel). Частота набора первичной последовательности составляла  $180 \text{ МГц}$ . Внешний интерфейс для выдачи результирующей случайной последовательности в непрерывном потоке – USB 2.0.

Достигнутая скорость генерации случайных 0 и 1 составила  $154.5 \text{ Мбит/с}$ .

**Среднее число фотонов, приходящихся на пиксел.** Оценим среднее число фотонов, падающих на отдельный пиксел. Эта оценка важна для того, чтобы быть уверенным, что генератор работает как квантовый, и, действительно, регистрируются фотоотсчеты от квазиоднофотонного излучения. Была оценена вероятность отсчета за один такт на SiPM  $P(*) \approx 0.45$ , откуда среднее число фотонов на один пиксел  $\mu = P(*) (\eta N_p / S_p) = 0.52 / (0.15 \cdot 4444 / 1.3 \cdot 1.3) \approx 1.3 \cdot 10^{-3}$ . Таким образом, реализован практически однофотонный режим.

**Распределение интервалов, корреляционная функция.** Если бы результаты измерений в тактах были бы независимыми, то мы бы имели дело с бернуллиевской последовательностью с вероятностями фотоотсчета  $P(*)$  и вероятностью отсутствия  $P(\square) = 1 - P(*)$ . Функция распределения временных интервалов между соседними фотоотсчетами  $*$ , разделенными  $k$  тактами (Time Slots), есть *геометрическое распределение*  $P_{\text{Bern}}(T) = (1 - P(*))^{T-1} P(*)$ . Напомним, что интервал  $T$  принимает дискретные значения  $T = n\tau$  ( $\tau = 1/180 \text{ МГц}$ ,  $n$  – число тактов). Логарифм функции распределения  $\log(P_{\text{Bern}}(T))$  представляет собой прямую. Пусть  $P_{\text{Exp}}(T)$  – реальная экспериментальная функция распределения интервалов, соответственно,  $\log(P_{\text{Exp}}(T))$ . Если сделать “подгонку” экспериментальной зависимости  $\log(P_{\text{Exp}}(k))$  прямой  $\log(P_{\text{Bern}}^{\text{Fit}}(T))$ , то разность  $\Delta(T) = \log(P_{\text{Bern}}^{\text{Fit}}(T)) - \log(P_{\text{Exp}}(T))$  будет давать наглядную меру отклонения экспериментального распределения от независимой бернуллиевской последовательности. Зависимость  $\Delta(T)$  приведена на рис. 2, откуда видно, что существуют зависимость между отсчетами. Видно также, что существенные корреляции (предыстория между отсчетами) распространяется примерно на глубину 10 тактов. Именно, такая глубина марковской цепи выбрана для реализации алгоритма экстракции. Выбор более мощной FPGA позволяет учесть большую глубину корреляций марковской цепи. Как будет видно ниже, при проведении тестов на случайность, глубина  $r = 10$  оказывается достаточной. Еще одной характеристикой глубины марковской цепи является *корреляционная функция первичной последовательности измерений*, которая была определена как среднее по выборке  $\text{CorrFun}(T = n\tau) = \frac{\sum_i^N s(i)}{N}$ , где  $N = 8 \cdot 10^9$  бит – длина выборки,  $s(n) = -1$ , если  $x(i) \oplus x(i + n) = 0$ , и  $s(n) = 1$ , если  $x(i) \oplus x(i + n) = 1$ . Зависимости  $\text{CorrFun}(T = n\tau)$  приведены на рис. 3. Для независимой бернуллиевской последовательности  $\text{CorrFun}(T = n\tau)$  должна быть прямой горизонтальной линией, не зависящей от  $T$ . Как видно из

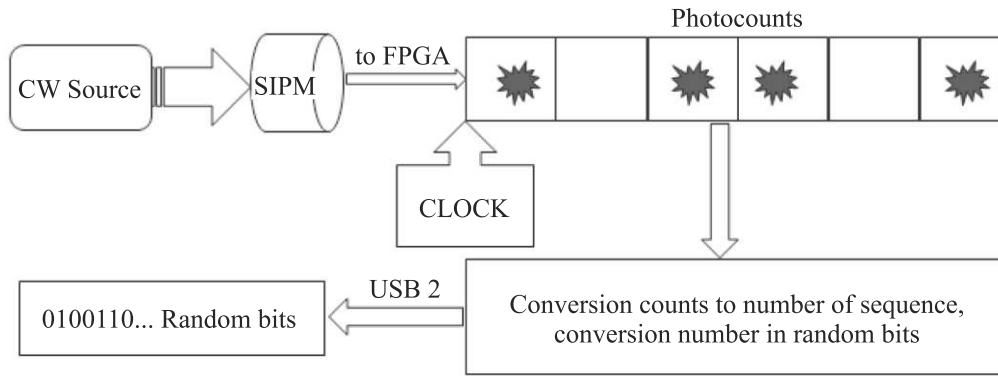


Рис. 1. (Цветной онлайн) Функциональная схема генератора случайных чисел

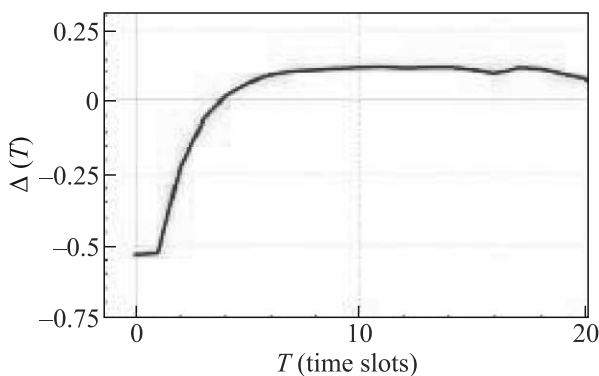


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость уклонения логарифма экспериментального распределения от логарифма геометрического распределения как функция числа тактов

рис. 3, глубина корреляций составляет не более 10 тактов, что оправдывает выбор глубины марковской цепи  $r = 10$ .

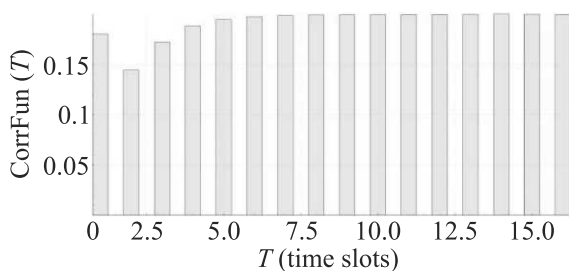


Рис. 3. (Цветной онлайн) Корреляционная функция в зависимости от числа тактов между измерениями

**Статистические тесты случайных последовательностей.** Для проверки однородности по числу 0 и 1 в выходной случайной последовательности был проведен отдельный тест на большой выборке, а именно, было сгенерировано 100 последовательностей, каждая длиной  $8 \cdot 10^9$  бит, для каждой последовательности вычислялась разница 0 и 1. График

зависимости разницы  $(\delta_{0/1}(n))$  как функция номера серии  $n$ , приведен на рис. 4 как функция числа последовательностей. Средняя разница по 0 и 1 по всем сериям составила  $9.2 \cdot 10^{-8}$ , что с запасом укладывается в интервал 3-сигма  $(\frac{3}{2} \sqrt{\frac{1}{100 \cdot 8 \cdot 10^9}} = 1.7 \cdot 10^{-6})$ .

В открытой печати имеется несколько наборов тестов на случайность [24]. Для проверки статистических свойств случайных последовательностей нами был выбран стандартный набор тестов NIST [24]. Данный набор тестов является минимально необходимым и является основанием для исследования последовательностей другими наборами специальных тестов. Кратко остановимся на идеологии проверки последовательности на случайность.

*Как уже упоминалось выше, нельзя доказать, что данная последовательность произошла из источника истинной случайности, можно лишь утверждать, что она не противоречит гипотезе случайности по некоторому статистическому критерию.*

Проверяется гипотеза  $H_0$  о том, что последовательность является истинно случайной. При этом предположении, различные статистики  $S$  – группировки 0 и 1 также являются случайными величинами, распределения вероятностей различных статистик при длине последовательности  $n \rightarrow \infty$  должны стремиться к некоторым эталонным распределениям для случайной последовательности. Фиксируется некоторый уровень значимости  $\alpha$  и пороговое значение для каждой статистики. Если вероятность уклонения статистики превышает пороговое значение, то гипотеза о случайности отклоняется. Это означает лишь то, что даже генератор идеальных случайных последовательностей может выдать последовательность, которая имеет такое уклонение.

Далее, подсчитывается вероятность  $P$ -value – вероятность того, что даже идеальный случайный ис-

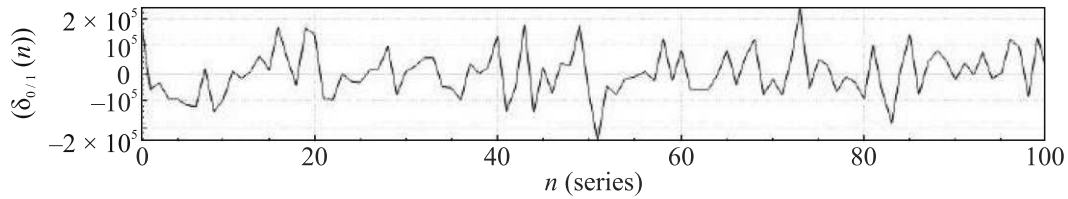


Рис. 4. (Цветной онлайн) Разность 0 и 1 как функция номера серии, каждая длиной  $8 \cdot 10^9$  бит

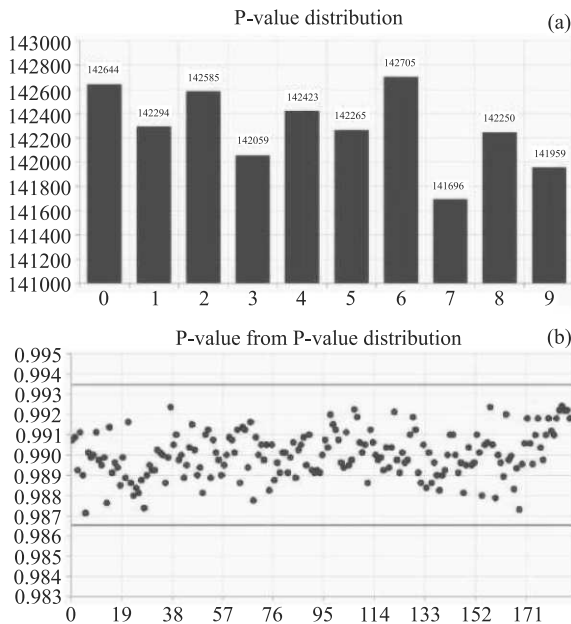


Рис. 5. (Цветной онлайн) (a) – Зависимости числа последовательностей по всем тестам, для которых значения  $P$ -value попадают в один из 10 интервалов. (b) – График  $P$ -value от  $P$ -value. По горизонтали показаны номера тестов от 1 до 16 по 10 сериям

точник может выдать последовательность с таким отклонением статистики. Если  $P > \alpha$ , то гипотеза  $H_0$  принимается, при  $P < \alpha$ , гипотеза отклоняется, последовательность считается не случайной.

**P-values для различных тестов.** Интерпретация  $P$ -value-значения. При заданном уровне значимости  $\alpha$ ,  $P$ -value имеет вероятность того, что даже идеальный генератор может сгенерировать с такой вероятностью последовательность, которая будет выглядеть как не случайная для данного теста. Чем меньше  $P$ -value, тем с меньшей вероятностью идеальный генератор “имеет право” сгенерировать такую последовательность. Если вычисленное  $P$ -value больше  $\alpha$ , то тест считается пройденным. Стандартное значение уровня значимости для  $\alpha \in [0.001, 0.01]$  [24]. Было использовано значение  $\alpha = 0.01$ .

Были проведены тесты с разными длинами и числом тестируемых последовательностей, полное чис-

ло тестов составило 188. Число тестируемых последовательностей  $M = 8000$ , длина каждой последовательности равнялась  $L = 1 \cdot 10^6$  бит. Для ряда тестов существует несколько проверок с различными шаблонами (см. детали в NIST [24]). Тест *Non Overlapping Template* был проведен для 148 шаблонов. Тест *Random Excursions* – для 8 вариантов. Тест *Random Excursions Variant* – для 18 вариантов параметров. Тест *Serial* – для двух вариантов параметров. Для данных тестов в табл. 1 указаны максимальное/минимальное значение доли последовательностей и значений  $P$ -value. Результаты тестов приведены в табл. 1.

Для одного теста – монобитный тест, кроме теста в стандартной идеологии NIST (см. табл. 1), был проведен для последовательности  $100 \cdot 8 \cdot 10^9$  бит (см. выше рис. 4), в отличие от других тестов, требующих большой компьютерной памяти, данный тест можно провести “на ходу”.

Доля последовательностей, прошедших тесты сама является случайной величиной. Допустимый диапазон флуктуаций определяется дисперсией  $P$ -value.  $P$ -value являются случайными величинами с распределением Бернулли с двумя исходами. Один исход – тест пройден, второй исход – тест не пройден. Допустимый разброс  $P$ -value должен укладываться в “три сигма”. Величина дисперсии для  $P$ -value есть  $\sqrt{\frac{P(1-P)}{M}}$  ( $M$  – число тестируемых последовательностей).

Согласно [24], при уровне значимости  $\alpha = 0.01$  все  $P$ -value должны попадать в интервал “три сигма”  $1 - P \pm 3\sqrt{\frac{P(1-P)}{M}} = 0.99 \pm 3\sqrt{\frac{0.99 \cdot 0.01}{M}}$ .

Интервал “три сигма” оказывается равным  $[0.987, 0.993]$  ( $M = 8000$ ). Как видно из табл. 1 и рис. 5а доля последовательностей, прошедших тесты, укладывается в доверительный интервал “три сигма” с хорошим запасом. По данному критерию гипотеза о происхождении последовательностей из случайного источника является справедливой.

**Однородность значений P-values.** Напомним, что  $P$ -value само является случайной величиной. Поэтому частота появлений значений  $P$ -values для раз-

Таблица 1. Значения  $P$ -value и доля последовательностей, прошедших различные тесты

N	Название теста $M = 8000$ $L = 1 \cdot 10^6$	$P$ -value	Доля последовательностей
1	Frequency Test	0.02415	0.99075
2	Block Frequency	0.89185	0.99087
3	Runs	0.56080	0.98925
4	Longest Runs	0.93061	0.99113
5	Rank	0.32405	0.98900
6	FFT Fast Fourier Transform	0.11899	0.9879
7	Non Overlapping Template	0.99519/0.02896	0.99238/0.98950
8	Overlapping Template	0.25798	0.98800
9	Cumulative Sums	0.14502	0.99000
10	Cumulative Sums Reverse	0.62619	0.98962
11	Universal	0.61423	0.99050
12	Approximate Entropy	0.00616	0.98787
13	Random Excursions	0.86223/0.18553	0.99201/0.86223
14	Random Excursions Variant	0.94519/0.04949	0.99242/0.98955
15	Serial	0.47163/0.09752	0.99238/0.99050
16	Linear Complexity	0.68127	0.99062

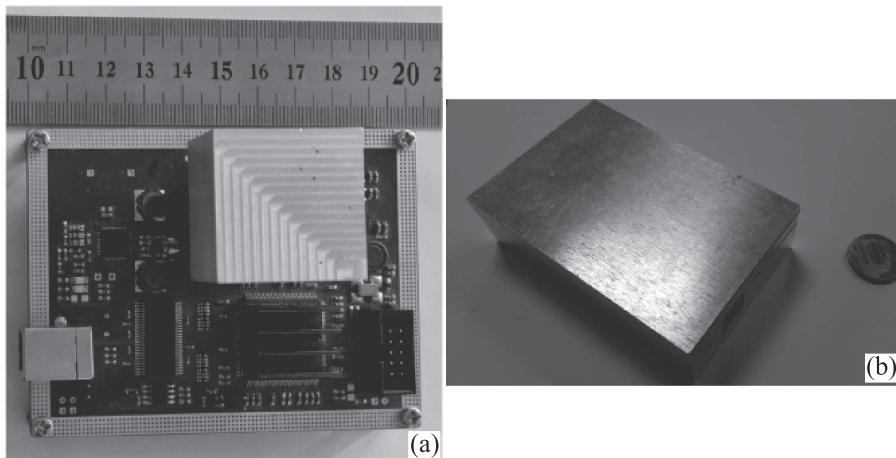


Рис. 6. (Цветной онлайн) (а) – Внешний вид генератора случайных чисел без внешнего корпуса – отладочный вариант. (б) – Внешний вид генератора в экранированном корпусе

личных тестов при большом объеме выборки распределена по нормальному закону. Если величины распределены по нормальному закону, статистика, которая приводится ниже, имеет распределение Пирсона (см., например, [25]). Тест на однородность значений  $P$ -value. При большом числе тестируемых последовательностей суммарное значение  $P$ -value по всем тестам есть сумма одинаково распределенных случайных величин, которая распределена по гауссовскому нормальному закону [25]. Определим статистику  $X_N^2 = \sum_{j=1}^N \frac{(\nu_j - N \cdot p_j)^2}{N \cdot p_j}$ , где  $\nu_j$  – доля значений  $P$ -value, попадающих в  $j$ -й интервал  $[0,1]$ ,  $p_j$  – истинная вероятность попадания в  $j$ -й интервал. При боль-

шом числе тестируемых последовательностей распределение вероятностей данной статистики  $X_N^2$  не зависит от распределения  $p_j$ , входящих в нее величин, и стремится к распределению Пирсона  $\chi^2(N-1)$  с  $(N-1)$ -й степенью свободы [25]. Рекомендуемое тестами NIST число интервалов равно  $N = 10$  [24]. Пороговое значение при нулевой гипотезе ( $H_0$  – последовательность случайна) допустимого разброса получается при заданном уровне значимости  $\alpha$  из соотношения  $\Pr\{X_N^2 > t_\alpha | H_0\} = \alpha$ , где  $t_\alpha = \chi_{1-\alpha, N-1}^2$  –  $(1-\alpha)$ -я квантиль распределения  $\chi^2$  с  $(N-1)$ -й степенью свободы. В нашем случае  $N = 10$  – число интервалов для значений  $P$ -value. Иными словами,

если отклонение статистики  $X_N^2 > \chi_{1-\alpha, N-1}^2$ , то нулевая гипотеза  $H_0$  отвергается, последовательность считается не случайной, поскольку отклонение статистики от допустимой нормы (при заданной вероятности – уровне значимости) превышено. Тест на однородность  $P$ -value считается пройденным, если  $P$ -value от  $P$ -value

$$\hat{P} = \frac{\int_{X_K^2}^{\infty} dx e^{-x/2} x^{K/2-1}}{2^{K/2} \Gamma(K/2)}, \quad K = N - 1,$$

не менее  $\hat{P} > 0.0001$ , то тест на однородность считается пройденным, и принимается  $H_0$  гипотеза.

На рисунке 5b приведены результаты теста на равномерность  $P$ -value. Значение  $P$ -values от  $P$ -value – равно:  $P$ -value = 0.722.  $P$ -values от  $P$ -values должны быть больше критического  $\hat{P}_c > 0.0001$ . Тест на равномерность  $P$ -value с запасом пройден. Для всех тестов доля последовательностей, прошедших тесты по величинам  $P$ -value лежит в пределах “три сигма”, что означает успешное прохождение тестов – гипотеза о случайности последовательности принимается.

Внешний вид генератора представлен на рис. 6.

**Закключение.** Для независимых измерений существуют эффективные методы экстракции истинно случайных последовательностей 0 и 1 из исходной последовательности [2, 18, 19].

Однако существуют фундаментальные ограничения Природы на скорость спадания корреляций между результатами измерений во времени, поэтому “дотянуться” до истинной случайности можно лишь за неограниченное время. Корреляции (зависимость) между измерениями *проникают* на неограниченную глубину по времени.

Эксперименты всегда проводятся на конечном временном отрезке, поэтому результаты последовательных измерений невозможно сделать независимыми. Все, что нам позволяет Природой, так это учитывать корреляции между измерениями на *конечную глубину* по времени. Причем явный (функциональный) вид корреляций в ситуации реального эксперимента неизвестен. Неизбежно приходится прибегать к приближениям. Адекватным приближением является учет корреляций на конечную глубину, которое дается стационарными цепями Маркова конечного порядка. В этом приближении корреляции описываются переходными (условными) вероятностями между результатами измерений. Важно, что явный вид самих переходных вероятностей неизвестен и не требуется при построении алгоритмов экстракции случайных битов.

*В приближении конечной глубины корреляций удается получить доказуемо случайные выходные битовые последовательности даже при зависимых исходах измерений. В этом подходе, в отличие от других подходов, например, с вероятностными экстракторами, используется фактически единственное предположение – о конечной глубине корреляций. Любые подходы к получению истинной случайности, по причине фундаментальных ограничений Природы, являются лишь приближением. Вопрос состоит лишь в том, насколько конкретное приближение адекватно описывает реальную ситуацию и сколько предположений содержится внутри данного приближения.*

*Доказательство случайности выходной битовой последовательности является нетривиальной задачей даже в рамках выбранного приближения. Далеко не все подходы позволяют получить доказуемую случайность.*

Авторы выражают благодарность И. М. Арбекову, А. Н. Климову, А. А. Калинин, В. О. Миронкину, а также сотрудникам: СФБ Лаборатории В. А. Кирюхиной, ИнфоТекс А. В. Уривскому за активное сотрудничество. Отдельная благодарность С. С. Негодяеву за помощь в реализации тестов NIST.

**Финансирование работы.** Работа выполнялась в рамках госзадания. Никаких дополнительных грантов на проведение или руководство данным конкретным исследованием получено не было.

**Конфликт интересов.** Конфликт интересов у авторов отсутствует.

1. M. Herrero-Collantes and J. Carlos Garcia-Escartin, Rev. Mod. Phys. **89**, 015004 (2017).
2. И. М. Арбеков, С. Н. Молотков, Успехи физических наук **191**, 651 (2021).
3. R. Shaltiel, Lect. Notes Comput. Sci. **6756**, 21 (2011).
4. A. De, Ch. Portmann, Th. Vidick, and R. Renner, arXiv:0912.5514 [quant-ph].
5. M. Blum, Combinatorica **6**, 97 (1986).
6. J. von Neumann, Appl. Math. Ser., Notes by G. E. Forstyle, Nat. Bur. Stand. **12**, 36 (1951).
7. W. Hoeffding and G. Simon, Ann. Math. Statist. **41**, 341 (1970).
8. Q. Stout and B. Warren, Ann. Probab. **12**, 212 (1984).
9. Y. Peres, Ann. Statist. **20**, 590 (1992).
10. P. Elias, Ann. Math. Statist. **43**, 865 (1972).
11. D. Knuth and A. Yao, *The complexity of nonuniform random number generation, Algorithms and Complexity: New Directions and Recent Results*, Academic Press, N.Y. (1976), p. 357.

12. T. S. Han and M. Hoshi, IEEE Trans. Inform. Theory **43**(2), 599 (1997).
13. P. A. Samuelsons, J. Amer. Statist. Assoc **63**(324), 1526 (1968).
14. H. Zhou and J. Bruck, IEEE Trans. Inform. Theory **58**, 2490 (2012).
15. Н. Винер, Р. Пэли, *Преобразование Фурье в комплексной области*, Наука, М. (1964), 268 с.
16. L. Fonda, G. C. Ghirardi, and A. Rimini, Rep. Prog. Phys. **41**, 587 (1978).
17. S. N. Molotkov, Laser Phys. Lett. **20**, 035202 (2023).
18. И. М. Арбеков, С. Н. Молотков, Успехи физических наук, в печати; DOI: 10.3367/UFNr.2024.02.039658.
19. В. Ф. Бабкин, Проблемы передачи информации **7**, 13 (1971).
20. С. Н. Молотков, Письма в ЖЭТФ **105**, 374 (2017).
21. К. А. Балыгин, В. И. Зайцев, А. Н. Климов, С. П. Кулик, С. Н. Молотков, ЖЭТФ **153**, 879 (2018).
22. K. A. Balygin, V. I. Zaitsev, A. N. Klimov, S. P. Kulik, S. N. Molotkov, E. Popova, and S. Vinogradov, Phys. Lett. **14**, 125207 (2017).
23. К. А. Балыгин, В. И. Зайцев, А. Н. Климов, С. П. Кулик, Письма в ЖЭТФ **106**, 451 (2017).
24. *A Statistical Test Suite for the Validation of Random Number Generators and Pseudo Random Number Generators for Cryptographic Applications*, <http://csrc.nist.gov/rng/SP800-22b.pdf>.
25. Г. И. Ивченко, Ю. И. Медведев, *Введение в математическую статистику*, Издательство ЛКИ, М. (2010), 600 с.



# Конформационное разнообразие липидов

И. А. Болдырев<sup>1)</sup>

Институт физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина РАН, 119071 Москва, Россия

Поступила в редакцию 10 ноября 2023 г.

После переработки 21 февраля 2024 г.

Принята к публикации 1 марта 2024 г.

В работе исследуется конформационное разнообразие гидрофобных цепей липидов. Даются ответы на вопросы: сколько всего возможно конформаций липидной цепи и сколько из них может реализоваться в реальной системе. Предлагается подход к анализу конформаций липидных молекул, основанный на теории множеств, и вводится равенство, связывающее наборы реализованных в липидной системе конформаций с энергией системы. С помощью теории множеств рассматривается вопрос о том, какие конформации гидрофобных цепей липидов могут быть реализованы в реальной системе. Сформулировано понятие ключевой конформации, позволяющее оценивать зависимость между структурными характеристиками липидов и энергетическими характеристиками мембран.

DOI: 10.31857/S1234567824070127, EDN: AJUJQN

**1. Введение.** Липиды выполняют несколько основных функций в живых организмах. Они служат структурными компонентами мембран, работают источниками энергии и тепла, являются сигнальными молекулами и формируют среду для функционирования белков. Липидный бислой обеспечивает функциональный барьер между субклеточными компартментами и между клеткой и ее окружением.

Липиды обладают огромным разнообразием химических структур [1]. Сигнальные липиды имеют разнообразные структуры для обеспечения специфических взаимодействий лиганд-рецептор [2, 3]; однако причины разнообразия структурных липидов мембран не всегда очевидны.

Кроме структурного, существует еще композиционное разнообразие [4] и липидный полиморфизм [5, 6]. Композиционное разнообразие (соотношение различных липидов в мембране) проявляется в различных масштабах: между биологическими видами, между тканями и/или клетками внутри организма, между различными органеллами и между сторонами мембраны и субдоменами мембраны.

Полиморфизм – это свойство липидов образовывать агрегаты разной формы. Например, ламеллярная фаза представляет собой чередование липидных и водных слоев. Чаще всего ламеллярная фаза встречается в виде одной ламеллы, разделяющей два водных объема. Эта одна ламелла и называется мембраной или бислоем. Распространены также мицеллярные, гексогональные и кубические фазы.

Отдельный и наименее изученный вид липидного разнообразия – конформационное разнообразие. Последнее основано на том, что каждая молекула липида может принимать множество различных конформаций. Именно эта гибкость лежит в основе липидного полиморфизма и способности липидной мембраны адаптироваться к внешним факторам.

Конформации гидрофобной цепи начали исследовать экспериментально в 70-х с помощью <sup>2</sup>H-ЯМР спектроскопии [7–10]<sup>2)</sup>. Для этого был синтезирован набор липидов, у которых один из атомов водорода в цепи заменен на дейтерий, а положение атомов дейтерия в цепи различное. Эксперимент позволил определить угол  $\theta$  между связью углерод-дейтерий и нормалью к бислою и вычислить параметр порядка  $S_i$ .

$$S_i = \frac{1}{2} \langle 3 \cos^2 \theta_i - 1 \rangle. \quad (1)$$

Скобки здесь обозначают усреднение, которое производится по двум C-H связям CH<sub>2</sub> группы, по всем CH<sub>2</sub> группам с одинаковым порядковым номером  $i$  и по времени эксперимента (в случае ЯМР-спектроскопии по времени релаксации). Набор параметров порядка для всех последовательных атомов углерода в цепи называется профилем параметра порядка. Профиль параметра порядка до сих пор используется в качестве характеристики структуры гидрофобной области липидного бислоя. Усреднения на основе профиля параметра порядка  $S_i$  легли в основу полуэмпирического подхода к описанию строе-

<sup>1)</sup>e-mail: i\_boldyrev@mail.ru

<sup>2)</sup>Обзоры ранних исследований [7, 8], современное состояние [9], база данных измеренных параметров [10].

ния мембран, предложенной С. Марчеля [11]<sup>3)</sup>. Альтернативно используются феноменологические [12–15] и ряд микроскопических подходов [16–19], наиболее современный из которых описывает липидную цепь как гибкую струну [20, 21]. Микроскопические подходы к описанию строения мембран позволяют корректно описывать фазовые переходы в мембранах [22] и вычислять профиль латерального давления [23]. Феноменологические подходы позволяют описывать ответ мембраны на различные внешние воздействия – от электропорации [24, 25] до взаимодействия с белками [26, 27], а также равновесные процессы внутри мембраны (например, [28, 29]). Физические (и феноменологические и микроскопические) подходы развились как теоретические модели, описывающие экспериментальные данные, и поэтому хорошо с ними согласуются.

Параллельно с развитием микроскопических подходов шло развитие методов молекулярной динамики (МД) [30–32]. Последние позволяют определять положение всех атомов в системе, и таким образом определить все реализуемые в данной системе конформации липидной цепи. МД позволяет вычислить и профиль параметра порядка [33], и профиль латерального давления [34], и другие параметры структуры системы. Физические методы и МД, хотя и взаимно дополняют друг друга, имеют ограничения в применении. Первые обладают уровнем обобщения, соответствия экспериментальным данным и предсказательной силой, недоступными для МД, а вторые оперируют детальной структурной информацией, которую сложно использовать в физических подходах. Таким образом исходя из физических моделей нельзя вывести структуру липидной молекулы с заданными свойствами, например, агента трансфекции или мембранотропного антибиотика. И наоборот, исходя из структуры молекулы сложно предсказать ее влияние на свойства мембраны (например, устойчивость к электрическому пробое).

Между тем оказалось, что способность липидов принимать различные конформации определяет свойства мембраны. Так экспериментально было обнаружено, что полное блокирование конформационной подвижности цепи приводит к невозможности молекул липида формировать нормальные агрегаты [35], а частичное блокирование конформационной подвижности приводит к увеличению прочности липидной мембраны на порядок [36]. Однако, роль каждой конкретной конформа-

ции или наборов конформаций остается не вполне понятной.

Для дальнейшего изучения роли индивидуальных конформаций липидов и конформационного разнообразия представляется перспективным перейти от усреднения всех конформаций липидных цепей к анализу конкретных конформаций, и оценке их места в сложившихся к настоящему моменту физических теориях строения мембраны.

В этой работе мы оцениваем, какое количество из всех возможных конформаций цепи может реализоваться в липидной системе, предлагаем подход к анализу липидных молекул, основанный на теории множеств и вводим равенство, связывающее наборы реализованных в липидной системе конформаций, с энергией мембраны.

## 2. Число конформаций гидрофобной цепи.

Гидрофобные цепи липидов имеют линейную структуру, представляют собой цепочку атомов углерода, связанных друг с другом одинарными или двойными связями (рис. 1).

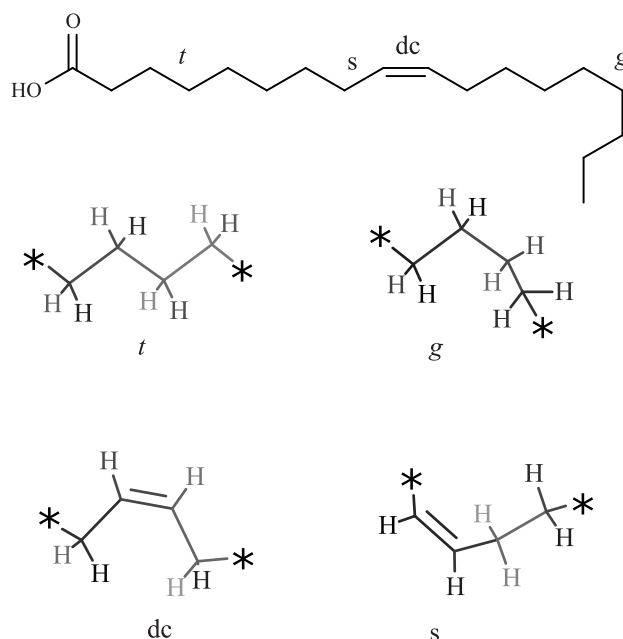


Рис. 1. Двугранные углы в гидрофобной цепи липида на примере олеинового остатка. Вверху – формула олеиновой кислоты. Внизу – геометрия фрагментов цепи в разных конфигурациях. Звездочка обозначает место продолжения углеводородной цепи. Простые одинарные связи могут принимать конфигурации транс (*t*) и гош (*g*). Двойная связь в липидах всегда встречается в цис конфигурации (*dc*). Одинарная связь, примыкающая к двойной (*s*) имеет два близких по геометрии и энергии конформера

<sup>3)</sup>При этом энергетические оценки С. Марчеля базируются на энергии транс-гош переходов.

Двойные связи в природных липидах находятся в *цис*-конфигурации. Свободное вращение вокруг двойных связей невозможно, поэтому двугранный угол в последовательности атомов углерода C-C=C-C всегда равен нулю. А число возможных конфигураций  $n = 1$ .

Вращение вокруг одинарных связей, наоборот, возможно. Но из-за стерических препятствий существуют локальные минимумы энергии, которые и определяют конфигурацию двугранного угла. Так двугранный угол в последовательности атомов углерода C-C-C-C может принимать три локальных минимума ( $n = 3$ ):  $180^\circ$ ,  $+60^\circ$  и  $-60^\circ$ . Они обозначаются как транс ( $t$ ), гош<sup>+</sup> ( $g^+$ ) и гош<sup>-</sup> ( $g^-$ ) конфигурации.

Конфигурация одинарных связей, примыкающих к двойным<sup>4)</sup>, отличается тем, что имеет два вырожденных локальных минимума ( $n = 2$ ). Двугранный угол принимает значения  $+120^\circ$  и  $-120^\circ$ <sup>5)</sup>.

Число всех возможных конформаций цепи  $N$  определяется числом возможных сочетаний конфигураций двугранных углов:

$$N = 3^k \cdot 2^l, \quad (2)$$

где  $k$  – число двугранных углов, образующих три конфигурации, а  $l$  – число двугранных углов, образующих две конфигурации. Двугранные углы, образованные двойными связями, мы не учитываем, потому что у них всего одна конфигурация.

Число возможных конформаций (числа сочетаний двугранных углов) для гидрофобного остатка может быть очень велико. Например у пальмитинового остатка (длина цепи – 16 атомов углерода) их больше 3 млн. Таблица 1 показывает, как при увеличении длины цепи возрастает количество возможных конформаций. Увеличение числа двойных связей уменьшает количество возможных конформеров. Сравните значения для стеаринового, олеинового, линолевого и линоленового остатков табл. 1.

Важно понимать, все ли эти конформации могут реализоваться на практике. Для примера рассмотрим липосому диаметром 100 нм, состоящую из

**Таблица 1.** Число возможных конформаций для цепей разной длины и с разным числом двойных связей

Название (длина цепи, число двойных связей)	Число конформаций
Октановая (C8, 0)	$3^5 \cdot 2^1 = 486$
Декановая (C10, 0)	$3^7 \cdot 2^1 = 4\,374$
Лауриновая (C12, 0)	$3^9 \cdot 2^1 = 39\,366$
Миристиновая (C14, 0)	$3^{11} \cdot 2^1 = 354\,294$
Пальмитиновая (C16, 0),	$3^{13} \cdot 2^1 = 3\,188\,646$
Стеариновая (C18, 0)	$3^{15} \cdot 2^1 = 28\,697\,814$
Олеиновая (C18, 1)	$3^{12} \cdot 2^3 = 4\,251\,528$
Линолевая (C18, 2)	$3^9 \cdot 2^5 = 629\,856$
Линоленовая (C18, 3)	$3^6 \cdot 2^7 = 93\,312$

дипальмитоилфосфатидилхолина<sup>6)</sup>. Принимая площадь на один липид  $\approx 70 \text{ \AA}^2$ , получим, что в одной липосоме (на обеих сторонах бислоя) примерно 90 000 молекул липидов. В каждом липиде два пальмитиновых остатка. Значит в липосоме их  $\approx 180\,000$  – на порядок меньше возможного числа конформаций пальмитинового остатка. Иными словами, в любой момент времени количество возможных конформаций липидов избыточно, относительно наблюдаемого на практике числа конформаций. Поэтому в системе одновременно не могут реализоваться все возможные конформации.

Конформации цепи энергетически не эквивалентны. Причина в разной энергии транс и гош конфигураций. Разница энергии между транс и гош конфигурациями,  $E_{t \rightarrow g}$ , равна примерно 2 кДж/моль [40]. На перевод пальмитиновой цепи из полностью транс в полностью *гош* конфигурацию потребуется 26 кДж/моль ( $2 \cdot 13$ ). Это высокие затраты энергии, сопоставимые с затратами на испарение одного моля воды ( $\approx 40$  кДж/моль).

Существует единственная конформация, у которой все двугранные углы находятся в транс конфигурации. Эта конформация обладает минимальной энергией. Рассмотрим, сколько может образоваться конформаций цепи при одном, двум или трех сегментах с гош конфигурацией в цепи. Задача определения числа возможных конформаций сводится к поиску числа различных положений гош двугранных углов в гидрофобной цепи. В комбинаторике эта задача описывается как поиск числа сочетаний из  $m$

<sup>4)</sup>Связь между атомом, имеющим  $sp^2$ -гибридизацию, и атомом, имеющим  $sp^3$ -гибридизацию. Такая связь встречается в последовательностях атомов C-C-C=C и C-C-C=O.

<sup>5)</sup>Двугранные углы, примыкающие к двойным связям изучались расчетными и спектральными методами [37–39]. Строго говоря возможные конформеры обладают разницей в энергии, но эта разница мала, а барьер перехода между конформерами низкий. Поэтому в настоящей работе такие конформеры считаются энергетически вырожденными.

<sup>6)</sup>Это распространенный природный липид. Например, сурфактант легкого примерно на 90% состоит из этого липида. Дипальмитоилфосфатидилхолин часто используется для создания модельных липидных систем потому, что длина гидрофобных цепей липидов в живых системах составляет, как правило, 16 или 18 атомов углерода. У дипальмитоилфосфатидилхолина длина цепей 16 атомов углерода.

элементов по  $k$  ( $A_m^k$ ); где  $k$  – число всех двугранных углов в цепи, а  $m$  – число углов в гош конфигурации. Для расчета энергий имеет значение разница между транс и гош конфигурациями. В этом случае не важно в какой тип гош конфигурации (+ или –) перешла транс конфигурация. Формула для определения числа конформеров  $N_c$  без учета разницы между  $g^+$  и  $g^-$  имеет вид:

$$N_c = A_m^k = \frac{k!}{m! \cdot (k-m)!}. \quad (3)$$

Если в цепи только один двугранный угол в гош конфигурации, то число возможных конформеров цепи равно  $k$ . Для пальмитинового остатка ( $k = 13, m = 1$ ) получается всего 13 конформеров. Если в дополнение к первому, появляется второй двугранный угол в гош конфигурации, то для него возможны 12 различных положений в цепи (одно уже занято). Получается всего  $N_c = \frac{13!}{2! \cdot (13-2)!} = 78$  конформаций. Причем с ростом количества гош-связей число возможных конформеров сначала увеличивается, а потом снижается (рис. 2а).

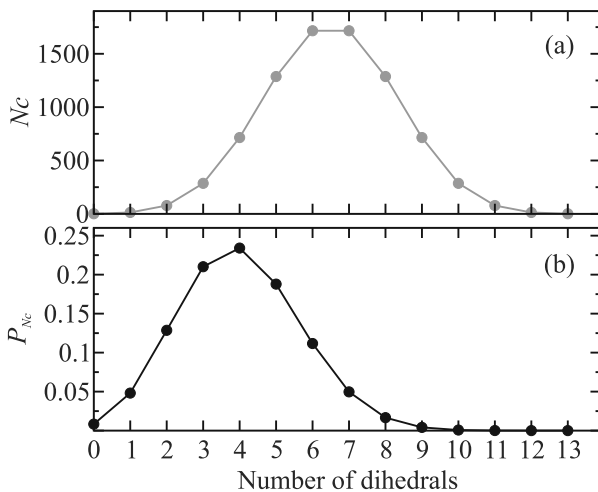


Рис. 2. (Цветной онлайн) Количество возможных конформаций, состояний молекулы (а), и их вероятностное распределение по Больцману (б) в зависимости от числа гош связей в цепи. Расчет выполнен для цепи с 13-ю двугранными углами

Поскольку конформации с разным числом гош связей отличаются друг от друга по энергии, то вероятность обнаружить в системе конформацию с определенным числом гош связей  $P_{N_c}$  описывается распределением Больцмана<sup>7)</sup>

<sup>7)</sup>Заметим также, что разница энергии между транс и гош конфигурациями (2кДж/моль или  $3.32 \cdot 10^{-21}$  Дж на 1 молекулу) близка к значению  $k_B T$  при комнатной температуре ( $4.11 \cdot 10^{-21}$  Дж).

$$P_{N_c} = \frac{\sum_{N_c} e^{-\epsilon_i/k_B T}}{\sum_N e^{-\epsilon_i/k_B T}}, \quad (4)$$

где  $\epsilon_i$  – энергия каждой конкретной конформации, равная  $E_{t \rightarrow g} \cdot m$ . Рассчитанные по формуле (4) значения  $P_{N_c}$  приведены на рис. 2б, из которого видно, что наиболее вероятной конформацией является не конформация с наименьшей энергией, а конформация с четырьмя гош связями. При этом таких конформеров, обладающих одинаковой энергией, согласно формуле 3 оказывается 715.

Расчеты по уравнению (4) приведены для молекул, не взаимодействующих друг с другом и с внешней средой, при допущении, что на конформационную подвижность цепи не оказывают влияние внешние факторы. В липидных мембранах это не так. На ориентацию и положение цепи в пространстве действуют внешние факторы<sup>8)</sup>, а значит существуют ограничения на возможные конформации.

Энергия цепи определяется через сумму внутренней энергии цепи и энергии взаимодействия этой цепи с соседними [11]:

$$E = E_{\text{int}} + E_{\text{disp}} + E_{\text{steric}}. \quad (5)$$

В уравнении (5)  $E_{\text{int}}$  представляет собой внутреннюю энергию одиночной цепи. Второе слагаемое  $E_{\text{disp}}$  – дисперсионные или Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия цепи с соседними цепями. Последнее слагаемое  $E_{\text{steric}}$  описывает стерическое отталкивание. Это важно, поскольку стерическое отталкивание соседних цепей ограничивает возможные конформации [16]. Важно и то, что слагаемые  $E_{\text{disp}}$  и  $E_{\text{steric}}$  имеют разные значения на разной глубине внутри мембраны. Например,  $E_{\text{steric}}$  описывается как профиль латерального давления, имеющий несколько сильно выраженных экстремумов.

Энергией  $E$  может обладать несколько конформаций цепи.

$$E = E_{\text{conf}1} = E_{\text{conf}2} = \dots = E_{\text{conf}i}. \quad (6)$$

Друг от друга эти конформации отличаются положением гош связей в цепи. Если отсутствуют внешние ограничения,  $E_{\text{disp}} = 0$ ;  $E_{\text{steric}} = 0$ , то  $E = E_{\text{int}}$ . Набор конформаций, существующий в системе, определяются уравнениями (3) и (4).

В реальной системе  $E_{\text{disp}} \neq 0$  и  $E_{\text{steric}} \neq 0$ , поэтому набор конформаций в ней более ограничен. Фак-

<sup>8)</sup>Например, контакты с другими липидами и холестерином, находящимися в липидном слое, или белками, адсорбированными на нем, или контакты липидной мембраны как целого с твердой подложкой. В последнем случае ограничивается вращательная и поступательная диффузия молекул.

тически формулы (5) и (6) вводят соотношение между силами, действующими внутри бислоя и структурами липидных конформеров.

$$E_{\text{int}} + E_{\text{disp}} + E_{\text{steric}} = E; \tag{7}$$

$$E \in (E_{\text{conf}1}, E_{\text{conf}2}, \dots, E_{\text{conf}i}).$$

**3. Описание конформационного разнообразия с использованием теории множеств.** Очень важно иметь подходящий инструмент для описания и характеристики различий конформеров независимо от того, существуют они в одной и той же или в разных липидных системах. Конформацию  $u$  молекулы цепи можно записать как последовательность двугранных углов. Это принципиально отличается от записи конформации в виде значений параметра порядка для последовательности атомов углерода, использованной в формуле (1). Например, для лауринового остатка (длина цепи 12 атомов углерода, 9 двугранных углов) возможна конформация, показанная на рис. 3 внизу.

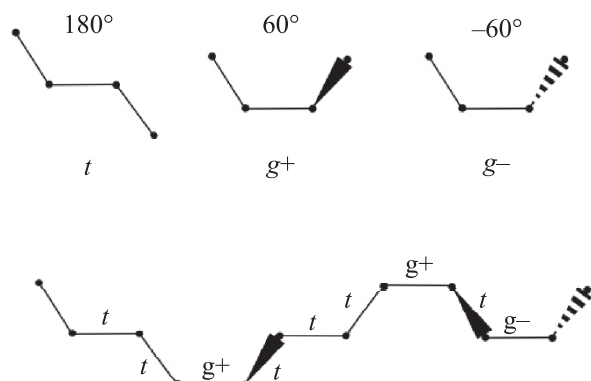


Рис. 3. Вверху: схематическое представление двугранных углов в углеводородных цепях. Атомы углерода обозначены черными точками. Внизу: представление углеводородной цепи длиной 12 атомов углерода как последовательности двугранных углов

Конфигурацию цепи, изображенной на рис. 3, можно записать в виде последовательности:

$$1 \ 2 \ 3 \ 4 \ 5 \ 6 \ 7 \ 8 \ 9$$

$$t \ t \ g^+ \ t \ t \ t \ g^+ \ t \ g^-$$

здесь цифры соответствуют порядковому номеру двугранного угла в цепи.

Все возможные конформации молекулы формируют универсальное множество  $U$ . Это множество конечно и счетно.

Любая произвольная конформация молекулы  $u_i$  является частью множества  $U$ :

$$u_i \in U. \tag{8}$$

Общее число возможных конформаций цепи представляет собой мощность универсального множества:

$$N = n^k = |U|. \tag{9}$$

Поскольку число возможных конформаций избыточно относительно липидных объектов (мицелл, липосом, мембран, липидных доменов в мембранах), то число реализованных конформаций цепей в составленном из липидов агрегате заведомо меньше числа возможных ее конформаций. Поэтому каждый составленный из липидов объект по числу реализованных в нем конформаций является лишь подмножеством  $U$ .

$$R \subseteq U, \tag{10}$$

где  $R$  – множество реализованных конформаций.

Множество  $R$  может быть большим и включать все молекулы, например, формирующие ламеллярную фазу, или малым и включать только несколько молекул, например, находящихся в контакте с мембранотропным пептидом<sup>9)</sup>.

Рассмотрим понятие множества реализованных конформаций подробнее на примере липидных агрегатов и фаз. Форма липидного агрегата может быть сферической (мицеллы), плоской (ламеллярная фаза, бислой) или трубчатой (гексагональная фаза). Известны также и более сложные структуры – кубические, ромбоэдрические, тетрагональные и орторомбические фазы. Фазы отличаются друг от друга геометрическими параметрами. Выделяют также разновидности фаз внутри одной. Так ламеллярная фаза может быть жидкой неупорядоченной  $L_d$ , жидкой упорядоченной  $L_o$  и гелевой  $S_o$ . С точки зрения конформаций разные объекты, сформированные из одинаковых липидов, например, разные фазы или разные формы агрегатов, отличаются друг от друга количеством и составом реализованных конформаций, иначе – множествами конформаций  $R_1, R_2, \dots, R_i$ . При этом любое множество  $R_i$  является подмножеством универсального множества  $U$ . Это означает, что любая произвольная конформация цепи  $r_i$  из любого множества  $R$  принадлежит множеству  $U$ . Обратное неверно. Существует множество конформаций входящих в  $U$ , но не входящих в  $R$ .

Множества  $R_i$  могут пересекаться, т.е. может существовать набор конформаций входящих, например, и в  $R_1$  и в  $R_2$ .

<sup>9)</sup>В этом случае также можно использовать термин “популяции” молекул.

Поскольку множества конформаций  $R$  зависят от внешних факторов, то при изменении этих внешних факторов множества могут переходить друг в друга. Например, при нагревании ламеллярной фазы происходит фазовый переход из гелевой упорядоченной фазы  $S_o$  в жидкую неупорядоченную фазу  $L_d$ . Последние отличаются наличием или отсутствием ближнего и дальнего порядка в упаковке молекул.  $S_o$  характеризуется наличием и ближнего, и дальнего порядка в упаковке липидов, а  $L_d$  – их отсутствием.

$$R_{S_o} \rightarrow R_{L_d} (R_{S_o} \subseteq U, R_{L_d} \subseteq U). \quad (11)$$

Переход из гелевой в жидкую неупорядоченную фазу сопровождается ростом разупорядоченности системы. Использование теории множеств позволяет выразить степень разупорядоченности липидной системы в численном виде. А именно, разупорядоченность  $\rho$  липидного объекта или фазы равна числу реализованных в данной системе индивидуальных конформаций или мощности множества  $|R|$ :

$$\rho = |R|. \quad (12)$$

Термотропный переход из  $S_o$  фазы в  $L_d$  приводит к росту разупорядоченности липидных цепей, т.е. к увеличению мощности множества конформаций:

$$\rho_{S_o} < \rho_{L_d}. \quad (13)$$

При термотропном переходе происходит повышение энергии системы за счет роста числа гош конфигураций в каждой цепи, как более высоких по энергии. Это означает, что самопроизвольные процессы идут с уменьшением числа гош связей и одновременным увеличением числа транс связей в цепи.

Примером адаптации липидной мембраны к внешним условиям являются фазовые переходы. Другие примеры адаптации липидной мембраны включают взаимодействие с белками, в том числе описываемые через гидрофобное несоответствие, образование и затягивание пор, увеличение и уменьшение локальной кривизны поверхности. Для описания этих процессов недостаточно оперировать лишь мощностями множества  $R$ . Необходим метод, который позволил бы провести усреднение по всем конформациям множества  $R$ , учитывал энергию конформации  $E_{\text{conf}}$  и сохранял информацию о структуре цепи.

**4. Ключевые конформации.** Множество реализованных в липидном объекте конформаций  $R$  конечно и счетно, также как конечно и счетно множество всех возможных конформаций  $U$ . Поскольку конфигурации транс, гош+ и гош- переходят друг

в друга, и есть разница в уровнях энергии между конфигурациями транс и гош, то множество  $R$  можно упрощенно представить как среднюю конформацию  $R_k$ . Ввиду ее значения представляется обоснованным определить такую конформацию как ключевую. Ключевая конформация имеет вид:

$$\begin{matrix} 1 & 2 & 3 & \dots & k \\ f_1 & f_2 & f_3 & \dots & f_k \end{matrix},$$

где  $f_i$  – доля транс конфигураций  $i$ -го двугранного угла среди всех гидрофобных цепей в множестве  $R$ , количество двугранных углов в транс конфигурации, деленное на число молекул в множестве  $R$ .

Энергию цепи в ключевой конфигурации можно определить по формуле:

$$E_{\text{conf}} = \sum_k (1 - f_i) \cdot E_{t \rightarrow g} \quad (14)$$

здесь  $E_{\text{conf}}$  представляет собой энергию одной гидрофобной цепи, усредненную по всему множеству  $R$ , а  $E_{t \rightarrow g}$  – энергия *транс-гош* перехода, оцениваемая в 2кДж.

Использование понятия ключевой конформации дает возможность сравнивать энергию конформации липидных цепей, находящихся под воздействием разных факторов. Например, липидов, находящихся на кромке сквозной поры и в основном объеме мембраны, или липидов находящихся в контакте с мембранным белком и вне этого контакта. Возможно также оценить энергию конформаций для всех липидов находящихся под воздействием внешнего фактора (множество  $R_f$ ):

$$E_f = \sum_{r \in R_f} E_{\text{conf}} = \sum_{r \in R_f} \sum_k (1 - f_i) \cdot E_{t \rightarrow g}. \quad (15)$$

Энергетический эффект фактора можно оценить, сравнивая суммы энергий отдельных конформаций цепи в области действия фактора и за ее пределами. При этом число липидов должно быть одинаковым.

**5. Заключение.** Современные физические теории строения биологических мембран, как феноменологические, так и микроскопические, хорошо согласуются с результатам реальных экспериментов, однако не вполне учитывают структуру липидных молекул. Это затрудняет более глубокое изучение липидных мембран и сокращает возможности проектировать новые липидные молекулы для практических целей. С другой стороны, современные методы молекулярной динамики дают большие массивы информации о структурах и динамическом изменении структур липидных молекул, которые не привязаны к физическим моделям и, как следствие, слабо связаны с макроскопическими параметрами липидных

систем. В данной работе на примере гидрофобных цепей липидов мы показали, что можно связать информацию о структуре липидов с энергией мембраны, ключевого параметра физических моделей мембран.

**Финансирование работы.** Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема 122011300058-3).

**Конфликт интересов.** Автор декларирует отсутствие конфликта интересов.

1. T. Narayana and H. Riezman, *Nat. Rev. Mol. Cell Biol.* **19**(5), 281 (2018).
2. H. Sunshine and M. L. Iruela-Arispe, *Current Opinion in Lipidology* **28**(5), 408 (2017).
3. X. Wang, *Current opinion in plant biology* **7**(3), 329 (2004).
4. D. Casares, P. V. Escribá, and C. A. Rosselló, *Int. J. Mol. Sci.* **20**(9), 2167 (2019).
5. B. de Kruijff, *Current Opinion in Chemical Biology* **1**(4), 564 (1997).
6. V. A. Frolov, A. V. Shnyrova, and J. Zimmerberg, *Cold Spring Harbor Perspectives in Biology* **3**(11), a004747 (2011).
7. J. Seeling, *Q. Rev. Biophys.* **10**, 353 (1977).
8. J. H. Davis, *BBA – Reviews on Biomembranes* **737**(1), 117 (1983).
9. T. Molugu, S. Lee, and M. Brown, *Chem. Rev.* **117**(19), 12087 (2017).
10. A. Leftin and M. Brown, *Biochimica et Biophysica Acta – Biomembranes* **1808**(3), 818 (2011).
11. S. Marčelja, *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) – Biomembranes* **367**(2), 165 (1974).
12. P. De Gennes, *Phys. Lett. A* **47**(2), 123 (1974).
13. W. Helfrich, *Z. Naturforsch.* **28**(11–12), 693 (1973).
14. Z. Tu and Z. Ou-Yang, *Adv. Colloid Interface Sci.* **208**, 66 (2014).
15. S. May, *Curr. Opin. Colloid Interface Sci.* **5**(3–4), 244 (2000).
16. J. F. Nagle, *J. Chem. Phys.* **58**(1), 252 (1973).
17. H. Scott and W.-H. Cheng, *Biophysical Journal* **28**(1), 117 (1979).
18. A. Caille, A. Rapini, M. Zuckermann, A. Cros, and S. Doniach, *Can. J. Phys.* **56**(3), 348 (1978).
19. M. Hamm and M. Kozlov, *Eur. Phys. J. E* **3**, 323 (2000).
20. S. I. Mukhin and S. Baoukina, *Physical. Rev. E* **71**(6), 061918 (2005).
21. S. I. Mukhin and B. B. Kheyfets, *Phys. Rev. E* **82**(5), 051901 (2010).
22. B. Kheyfets, T. Galimzyanov, and S. Mukhin, *JETP Lett.* **107**, 718 (2018).
23. A. Drozdova and S. Mukhin, *JETP* **125**, 357 (2017).
24. S. A. Akimov, P. E. Volynsky, T. R. Galimzyanov, P. I. Kuzmin, K. V. Pavlov, and O. V. Batishchev, *Sci. Rep.* **7**(1), 12152 (2017).
25. S. Akimov, P. Volynsky, T. Galimzyanov, P. Kuzmin, K. Pavlov, and O. Batishchev, *Sci. Rep.* **7**(1), 12509 (2017).
26. O. G. Mouritsen and M. Bloom, *Annual Review of Biophysics and Biomolecular structure* **22**(1), 145 (1993).
27. M. F. Brown, *Biochemistry* **51**(49), 9782 (2012).
28. S. A. Akimov, P. I. Kuzmin, J. Zimmerberg, and F. S. Cohen, *Phys. Rev. E* **75**(1), 011919 (2007).
29. T. R. Galimzyanov, R. J. Molotkovsky, M. E. Bozdaganyan, F. S. Cohen, P. Pohl, and S. A. Akimov, *Phys. Rev. Lett.* **115**(8), 088101 (2015).
30. S. E. Feller, *Curr. Opin. Colloid Interface Sci.* **5**(3–4), 217 (2000).
31. R. M. Venable, F. L. Brown, and R. W. Pastor, *Chemistry and Physics of Lipids* **192**, 60 (2015).
32. R. M. Venable, A. Kramer, and R. W. Pastor, *Chem. Rev.* **119**(9), 5954 (2019).
33. L. S. Vermeer, B. L. De Groot, V. Réat, A. Milon, and J. Czaplicki, *Eur. Biophys. J.* **36**(8), 919 (2007).
34. K. V. Pinigin, *Membranes* **12**(11), 1149 (2022).
35. A. Semenova, A. Chugunov, P. Dubovskii, V. Chupin, P. Volynsky, and I. Boldyrev, *Chemistry and Physics of Lipids* **165**(4), 382 (2012).
36. O. Batishchev, A. Alekseeva, D. Tretiakova, T. Galimzyanov, A. Chernyadyev, N. Onishchenko, P. Volynsky, and I. Boldyrev, *Soft Matter* **16**(13), 3216 (2020).
37. S. E. Feller, K. Gawrisch, and A. D. MacKerell, *J. Am. Chem. Soc.* **124**(2), 318 (2002).
38. T. Gocen, S. H. Bayarı, and M. H. Guven, *J. Mol. Struct.* **1150**, 68 (2017).
39. M. R. Rich, *Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Molecular Cell Research* **1178**(1), 87 (1993).
40. I. Kanosaka, R. G. Snyder, and H. L. Strauss, *J. Chem. Phys.* **84**(1), 395 (1986).

# Обработка спектров комбинационного рассеяния света новообразований кожи методом лоренцевой аппроксимации: пилотные исследования<sup>1)</sup>

И. Н. Сараева<sup>+2)</sup>, Е. Н. Римская<sup>+</sup>, А. Б. Тимурзиева<sup>+\*</sup>, А. В. Горевой<sup>+</sup>, С. Н. Шельгина<sup>+</sup>, В. И. Попадюк<sup>×</sup>,  
Е. В. Переведенцева<sup>+</sup>, С. И. Кудряшов<sup>+</sup>

<sup>+</sup> Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

<sup>\*</sup> Федеральное государственное бюджетное научное учреждение  
“Национальный научный исследовательский институт общественного здоровья имени Н. А. Семашко”,  
105064 Москва, Россия

<sup>×</sup> Российский университет дружбы народов им. П. Лулумы, 117198 Москва, Россия

Поступила в редакцию 22 декабря 2023 г.

После переработки 7 марта 2024 г.

Принята к публикации 7 марта 2024 г.

Конфокальная микроспектроскопия комбинационного рассеяния света предоставляет возможность диагностики рака путем количественного анализа спектральных особенностей и выявления основных биохимических изменений. Была проведена дифференциация злокачественных новообразований кожи (базальноклеточной карциномы кожи, плоскоклеточной карциномы), доброкачественных новообразований кожи (папиллома) и здоровой кожи путем получения спектров комбинационного рассеяния света *in vitro* при возбуждении на длинах волн 532 и 785 нм. Нами представлен новый метод анализа параметров спектральных полос, основанный на расчете второй производной и лоренцевой аппроксимации спектров. В результате использования данного метода на малой выборке новообразований кожи было установлено, что процессы в опухолях кожи могут вызывать деформацию вторичной структуры белков, приводящую к деградации и смещению соответствующих полос ( $972\text{ см}^{-1}$ ,  $1655\text{ см}^{-1}$ ) в область низких частот. Полосы, соответствующие липидам, в новообразованиях кожи либо расширяются и увеличиваются, либо расщепляются на два пика (полосы  $1061$ ,  $1127$ ,  $1297$ ,  $1439$ ,  $1745\text{ см}^{-1}$ ). Нарушение структуры липидов, также обозначенное в нескольких полосах как сдвиг в сторону меньших волновых чисел, возможно, обусловлено повышенной текучестью клеточной мембраны в опухолях. Результаты исследования могут быть полезны для разработки методов оптической биопсии для ранней диагностики опухолей.

DOI: 10.31857/S1234567824070139, EDN: VAPYKS

**1. Введение.** Дифференциация доброкачественных и злокачественных новообразований кожи изучается уже несколько лет как *in vitro*, так и *in vivo* [1–7]. Рак вызывает изменения в структуре клетки ткани, которые можно обнаружить с помощью микроспектроскопии. Наиболее часто используемые методы пост-анализа спектров включают стандартный анализ главных компонент (PCA) [8, 9], анализ разрешения многомерных кривых (MCR) [3, 5], дискриминантный анализ частичных наименьших квадратов (PLS/DA) [8–13] и другие, позволяющие выявлять базальноклеточную карциному (БКК) и плоскоклеточную карциному (ПКК). Процессы в опухолях приводят к увеличению ядерно-

цитоплазматического отношения (отношения площади ядра и цитоплазмы), нарушению структуры хроматина, изменению содержания липидов и белков [14]. С помощью конфокальной микроспектроскопии КР авторы одной из работ [15] продемонстрировали, что вклад нуклеиновых кислот, гистонов и белков в КР спектры ядер опухолевых клеток отличается от такового в нормальных эпидермальных клетках. Установлено, что дерма вблизи границ опухоли испытывает дефицит коллагена и имеет признаки структурных изменений.

В данной работе мы предлагаем использовать метод дифференцирования, основанный на анализе второй производной спектров КР, полученных при возбуждении на длинах волн 532 и 785 нм [9, 16, 17]. Поиск скрытых пиков методом расчета второй производной широко применяется при анализе спектров инфракрасного (ИК)-Фурье пропуска-

<sup>1)</sup> См. дополнительный материал к данной статье на сайте нашего журнала [www.jetpletters.ac.ru](http://www.jetpletters.ac.ru)

<sup>2)</sup> e-mail: [saraevain@lebedev.ru](mailto:saraevain@lebedev.ru)



ния/отражения, например, для изучения процессов, протекающих при воздействии тех или иных антибактериальных агентов [18, 19]. Тем не менее, в спектроскопии комбинационного рассеяния он применяется реже [20–26], а именно, для анализа новообразований кожи – впервые в нашей статье.

Анализ второй производной спектров КР позволяет обнаружить различия в параметрах спектральных полос, таких как волновое число, ширина полосы на уровне 0.5 от максимума (FWHM) и площадь, которые содержат важную информацию о конформационном порядке/беспорядке соответствующей молекулярной связи и помогают понять принципиальные изменения, возникающие при формировании опухоли. Так, уширение амидных полос часто связывают с возникающим нарушением вторичной структуры белков, которое может быть вызвано повреждением или мутацией клеток. Подобного рода анализ спектральных полос эффективнее всего проводить с помощью лоренцевой аппроксимации спектров, где разница между контролем (здоровая кожа) и патологией более отчетливо видна на спектрах второй производной.

В данной работе мы приводим сравнительный анализ БКК, ПКК, папилломы и здоровой кожи путем расчета спектров вторых производных и определения параметров пика (спектрального положения, полосы пропускания, площади под кривой).

**2. Техника и методика эксперимента.** Образцы здоровой кожи и опухолей были получены путем хирургического удаления. Предварительный диагноз ставил врач дерматолог-онколог, а точный диагноз после удаления новообразования был получен с помощью гистологических исследований (“золотой стандарт” диагностики). Каждую опухоль вместе с интактной тканью помещали в физраствор. Спектры КР были зарегистрированы для семи образцов БКК, пяти ПКК, трех папиллом и пяти образцов здоровой кожи, от 10 до 20 спектров в разных точках каждого образца. Всего был исследован 21 образец новообразований кожи пациентов обоих полов, в возрасте от 37 до 73 лет. Образцы соответствовали диагностированным случаям папилломы, карциномы, рака кожи и здоровой кожи. Все образцы хранились в одинаковых условиях (NaCl раствор 0.9%). Более подробные сведения приведены в табл. S1 дополнительных материалов.

Спектры КР были получены с помощью спектрометра Renishaw inVia Basis (inVia InSpect, Renishaw, Лондон, Великобритания) при возбуждении на длине волны 785 нм, энергии до 45 мВт, времени сбора данных 10 с с использованием 50-кратного объекти-

ва (NPlan 50/0.50 Leica, Wetzlar, Германия), а также спектрометра Confotec MR520 (SOL Instruments, Минск, Беларусь) при длине волны лазера 532 нм, мощности лазера 15 мВт, времени накопления 2 с, с использованием 40-кратного объектива (MPlanFL, Nikon, Токио, Япония) с числовой апертурой 0.75 и рабочим расстоянием 0.66 мм.

Фоновый сигнал флуоресценции удаляли из зарегистрированных спектров с помощью алгоритма Ванкувера, который представляет собой улучшенный мультиполимодалный метод удаления базовой линии, оптимизированный для флуоресценции биомедицинских образцов (использовался полином 5 степени) [27]. Полученные спектры были сглажены и нормированы на наиболее интенсивные полосы КР в диапазоне 1200–1800 см<sup>-1</sup> [16].

Усредненные обработанные спектры для каждого образца аппроксимировались с помощью Лоренцева приближения с использованием программного обеспечения OriginPro (OriginPro 2019b 9.6.5.169) согласно отработанной методике [18, 19]. Процедура аппроксимации заключается в приближении формы пиков в обработанных спектрах КР к форме Лоренцева контура:

$$y = y_0 + \frac{2A}{\pi} \frac{w}{4(x - x_c)^2 + w^2}, \quad (1)$$

где  $H = 2 \cdot A / (\pi \cdot w)$  – высота пика;  $A$  – площадь под кривой;  $w$  – ширина полосы (FWHM);  $x_c$  – положение максимума (центральная частота в см<sup>-1</sup>);  $y_c$  и  $y_0$  – максимальный и фоновый сигнал соответственно (рис. 1).

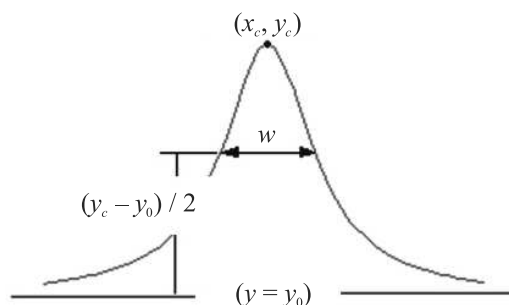


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схематичное изображение Лоренцева контура, согласно которому осуществляется аппроксимация спектров КР

Обнаружение полос КР (скрытых пиков) осуществлялось путем определения локальных максимумов второй производной со сглаживанием Савицкого–Голея. Найденные значения (положения максимумов второй производной  $x_c$ ) фиксировались, после чего все пики аппроксимировались

Лоренцевым приближением (1), в результате чего были получены значения ширины полосы  $w$  и площади под кривой  $A$ . Разброс данных значений (стандартное отклонение) оценивался программой в соответствии с оценкой уровня шума и величиной остаточной ошибки.

### 3. Результаты и обсуждение.

*3.1. Вторые производные спектров КР.* Усредненные спектры КР для здоровой кожи, БКК, ПКК и папилломы, полученные при возбуждении на длинах волн 532 и 785 нм (далее обозначены в тексте как  $\lambda_{532}$  и  $\lambda_{785}$ ), и их вторые производные представлены на рис. 2.

Параметры спектральных полос были получены методом Лоренцева приближения, описанным в разделе 2. Данные значения отображены в табл. S2, S3, где каждая ячейка включает до трех строк, соответствующих положению максимума, ширине полосы (FWHM) и площади под кривыми со стандартными ошибками (табл. S2, расшифровка спектральных полос дана по данным [9, 28–35]; табл. S1, доступны в дополнительных материалах).

*3.1.1. ДНК/РНК.* Полоса  $1085\text{ см}^{-1}$ , отнесенная к валентным колебаниям  $\text{PO}_2$  в нуклеиновых кислотах [28, 34, 35], смещается в сторону более высоких волновых чисел в спектрах БКК и папилломы при  $\lambda_{785}$ , и для всех опухолей – к более низким волновым числам при  $\lambda_{532}$  (см. рис. 2 и табл. S2). При  $\lambda_{532}$  площадь под кривой существенно уменьшается в спектрах ПКК, а ширина полосы увеличивается в спектрах новообразований, уменьшаясь для всех опухолей при  $\lambda_{785}$ . О падении интенсивности и сдвиге в сторону меньших волновых чисел сообщалось ранее [36], и подобное отклонение может быть вызвано одно- и двухцепочечным разрывом ДНК [37]. Другая полоса, связанная с  $\text{PO}_2$ , появляется во всех злокачественных опухолях на обеих длинах волн возбуждения в области  $\sim 1100\text{--}1104\text{ см}^{-1}$  [38]. Возможно, эта полоса является результатом избыточной репликации ДНК при росте новообразований [31]. Полоса  $1175\text{ см}^{-1}$ , связанная с цитозином (C) и гуанином (G) [39], смещается в сторону больших волновых чисел для БКК и папилломы и наоборот – для ПКК (рис. 2 и табл. S3). Для  $\lambda_{785}$  она сдвигается к более высоким волновым числам во всех спектрах опухолей.

Площадь для полосы ДНК/РНК с центром  $1344\text{ см}^{-1}$  [40] увеличивается в спектрах ПКК и папилломы на обеих длинах волн возбуждения (рис. 2 и табл. S2). Уширение полос на  $\lambda_{785}$  может быть результатом разрушения нуклеиновых кислот [28, 31, 37]. В спектрах папилломы площадь полос значительно увеличивается, что можно объяснить

более интенсивной репликацией ДНК при злокачественных новообразованиях [28, 37].

Кольцевые симметричные (breathing) моды в аденине (A), G отображаются в спектрах в виде полосы на  $1490\text{ см}^{-1}$  [41–43]. Эта полоса обнаружена только в спектрах ПКК и папилломы при  $\lambda_{532}$  и во всех образцах, кроме папилломы при  $\lambda_{785}$  (рис. 1, табл. S2).

*3.1.2. Повреждение мембраны.* Полоса с центром  $1031\text{ см}^{-1}$ , соответствующая молекулярным колебаниям фосфолипидов, сужается для ПКК и расширяется для папилломы на обеих длинах волн возбуждения; ее интенсивность возрастает в спектрах папиллом при  $\lambda_{532}$  (рис. 2 и табл. S2) и в спектрах ПКК при  $\lambda_{785}$ . Валентные колебания C-C-цепи липидов клеточной стенки приводят к появлению пика при  $1063\text{ см}^{-1}$  [28, 44], который расширяется в спектрах БКК, и его площадь увеличивается. Пик отсутствует в ПКК и папилломе. При  $\lambda_{785}$  пик увеличивается, и его площадь растет во всех спектрах опухолей. Полоса  $1127\text{ см}^{-1}$ , которую можно отнести к липидам, в спектрах новообразований сужается при  $\lambda_{532}$ , хотя соответствующая ей площадь увеличивается. При  $\lambda_{785}$  не наблюдается сильного изменения ширины полосы или площади.

*3.1.3. Липиды.* Полоса  $1301\text{ см}^{-1}$ , связанная с колебаниями  $\text{CH}_2$  в насыщенных липидах, чувствительна к нарушению конформационной упорядоченности в клетках [28–30, 45]. Ее положение смещается в сторону более высоких частот в спектрах ПКК и папилломы при  $\lambda_{532}$  и в спектрах всех образцов опухолей – при  $\lambda_{785}$  (рис. 2, табл. S2). Пик уширяется в БКК и ПКК, его площадь увеличивается на обеих длинах волн возбуждения. Сдвиг в сторону более высоких волновых чисел свидетельствует о деформации молекулярной структуры липидов (более высоким содержанием gauche-конформеров) [28, 39, 45]. Полоса с центром  $1398\text{ см}^{-1}$ , обусловленная колебаниями  $\text{CH}_3$ , в спектрах новообразований кожи смещается в сторону меньших волновых чисел (рис. 2, табл. S2), а ее интенсивность существенно возрастает в спектрах ПКК и папилломы (рис. 2а, б) на  $\lambda_{532}$ , в то время как на  $\lambda_{785}$  данный пик обнаруживается только для ПКК и папилломы (рис. 2с, d). Колебания  $\text{CH}_2$  соответствуют пику на  $1438\text{ см}^{-1}$  [46], который уширяется в опухолях на обеих длинах волн возбуждения. Его площадь уменьшается для БКК и ПКК и увеличивается для папилломы на  $\lambda_{532}$ , увеличивается в БКК и остается неизменной в ПКК и папилломе на  $\lambda_{785}$ . Об аналогичном уменьшении площади под кривой сообщалось ранее [36]. Пик демонстрирует значительный сдвиг в сторону более высоких волновых чисел в спектрах новообразований для обе-

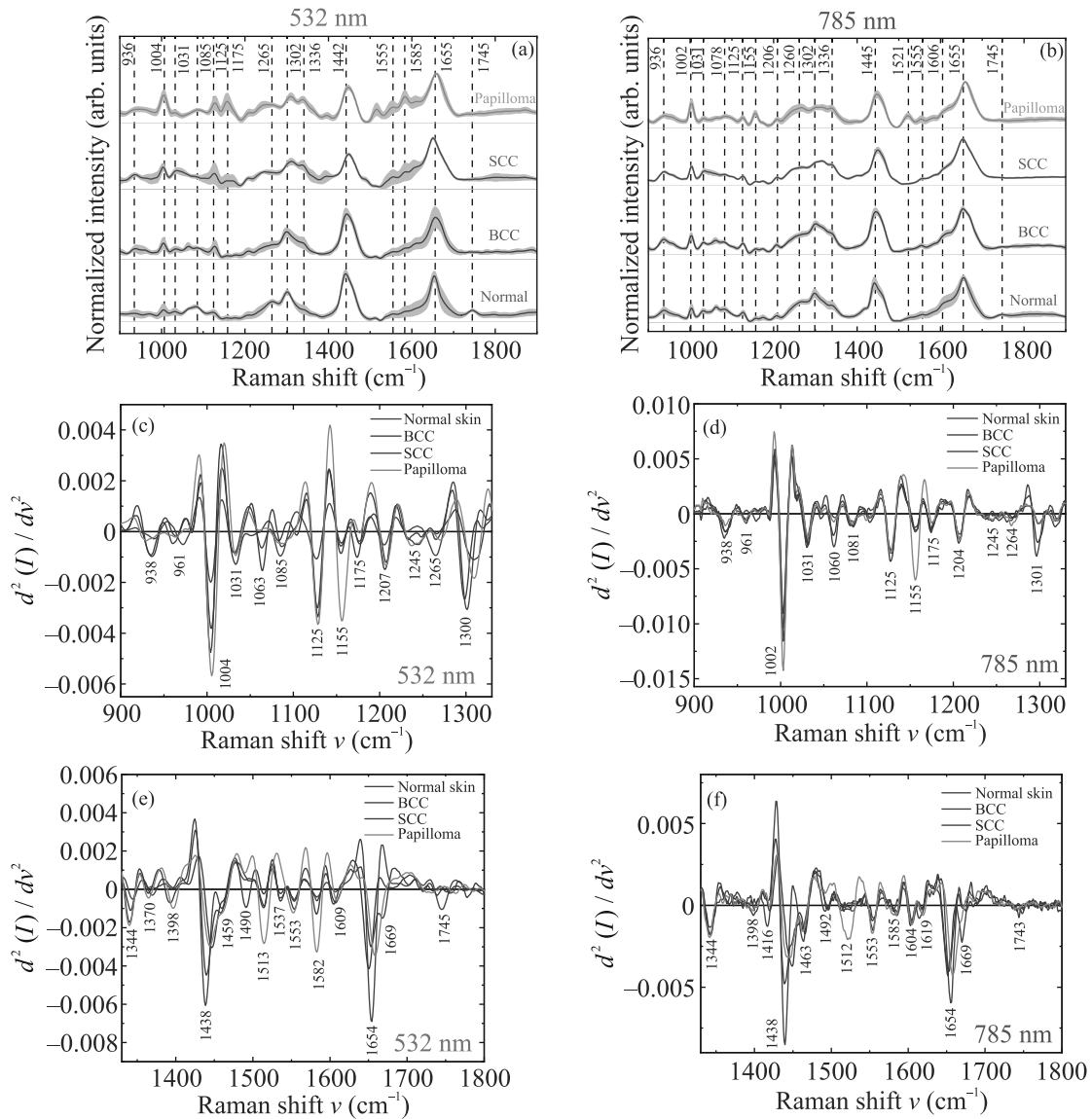


Рис. 2. (Цветной онлайн) Усредненные спектры КР здоровой кожи (normal skin, зеленая линия) и новообразований (базальноклеточная карцинома (BCC), синяя линия; плоскоклеточная карцинома (SCC), фиолетовая линия; папиллома (papilloma) оранжевая линия), полученные при двух длинах волн возбуждения: 532 нм (а) и 785 нм (b). Серой полутью обозначено среднее квадратичное отклонение. Соответствующие спектры второй производной, полученные при двух длинах волн возбуждения: 532 нм (c), (e) и 785 нм (d), (f), представлены в двух областях: (c), (d) от 900 до 1330  $\text{cm}^{-1}$  и (e), (f) от 1330 до 1800  $\text{cm}^{-1}$

их длин волн возбуждения, причем изменение более выражено для плоскоклеточного рака и папилломы, что можно объяснить более явным нарушением молекулярной структуры липидов.

Другая полоса, с центром 1416  $\text{cm}^{-1}$ , соответствует колебаниям в керамиде III (рис. 2, табл. S2). Керамиды также присутствуют в клеточной мембране, поэтому наблюдаемый сдвиг полосы в сторону более высоких волновых чисел для всех новообразований кожи на обеих длинах волн возбуждения может

быть обусловлен нарушением молекулярной структуры липидов в злокачественных новообразованиях кожи [28, 31]. Его интенсивность возрастает в БКК и ПКК при  $\lambda_{532}$  и уменьшается для всех опухолей при  $\lambda_{785}$  согласно спектрам второй производной (рис. 2).

Полоса 1459  $\text{cm}^{-1}$  относится как к белкам, так и к липидам [28, 31], причем соответствующая ей площадь уменьшается в ПКК и папилломе (в большей степени в ПКК), и увеличивается в БКК для обеих длин волн возбуждения (рис. 2, табл. S2).

Интересно, что изначально одиночная полоса с центром  $1744\text{ см}^{-1}$  в спектрах здоровой кожи, отнесенная к эфирным колебаниям в липидах [47], в спектрах опухолей разделилась на две слабые полосы при  $\lambda_{532}$  (рис. 2, табл. S2). Такой тенденции не наблюдалось для  $\lambda_{785}$ , где пик на  $1745\text{ см}^{-1}$  смещался в сторону более высоких волновых чисел в спектрах ПКК и более низких – в спектрах папиллом, упираясь во всех образцах опухолей. Причиной этого может быть высокий уровень шума, из-за которого изменения становятся незаметными.

*3.1.4. Белки.* Линия  $937\text{ см}^{-1}$  относится к коллагену [29, 39, 46], и в спектрах новообразований она демонстрирует уширение и увеличение площади при  $\lambda_{532}$ , сужение и уменьшение площади – при  $\lambda_{785}$  (рис. 2, табл. S2). Полоса  $971\text{ см}^{-1}$ , также соответствующая белкам [39], в опухолях расщепляется на две полосы, практически исчезая в папилломах при  $\lambda_{532}$ . В спектрах злокачественных новообразований обнаруживается только одна из полос при  $\lambda_{785}$ . Пики, расположенные на  $961\text{ см}^{-1}$  и  $983\text{ см}^{-1}$ , иллюстрируют молекулярные колебания  $\alpha$ -спиралей и  $\beta$ -листов в белках, соответственно. Подобное расщепление может быть вызвано возможными изменениями кератиноцитов, имеющих атипичные ядра (увеличенные, неравномерные, гиперхромные) в ПКК [48]. Вторичная структура гистонов состоит в основном из  $\alpha$ -спиралей, тогда как в фибрине преимущественно существуют  $\beta$ -листы, что позволяет предположить, что наблюдаемое увеличение интенсивности полосы  $983\text{ см}^{-1}$  вызвано фибрином, окружающим раковые клетки и образующим структуру, защищающую опухоли от клеток иммунной системы, который был обнаружен внутри и вокруг различных типов опухолей в ряде работ [49–52].

Полоса  $1004\text{ см}^{-1}$  соответствует колебаниям фенилаланина (Phe) [28, 34], и в спектрах опухолей она сужается при  $\lambda_{532}$  и расширяется при  $\lambda_{785}$  (рис. 2, табл. S2). Предположительно Phe также представлен полосами на  $1582\text{ см}^{-1}$  и  $1605\text{ см}^{-1}$  [53]. Ширина и площадь полосы на  $1582\text{ см}^{-1}$  существенно увеличиваются в спектрах ПКК и папиллом (рис. 2, табл. S2), но уменьшаются в БКК при  $\lambda_{532}$ , и наоборот – при  $\lambda_{785}$ . Полоса с центром  $1605\text{ см}^{-1}$  [54] существенно сужается в ПКК и папилломе при  $\lambda_{532}$ , но уширяется при  $\lambda_{785}$ . Соответствующая ей площадь уменьшается в спектрах ПКК при  $\lambda_{532}$  и остается неизменной при  $\lambda_{785}$ ; однако следует учитывать также вклад тирозина и цитозина в интенсивность данной полосы. О значительном увеличении площади для полосы  $1605\text{ см}^{-1}$  в новообразованиях сообщалось ранее [55]. Площадь пика в БКК и папилломе увеличивается

для обеих длин волн возбуждения (рис. 2, табл. S2). Полоса  $1609\text{--}1615\text{ см}^{-1}$  связана с тирозином; в ПКК она смещается в сторону меньших волновых чисел при  $\lambda_{532}$ , а во всех новообразованиях – наоборот при  $\lambda_{785}$ . Она становится более выраженной в опухолях на всех длинах волн возбуждения, что может указывать на ее сужение. Согласно спектрам второй производной, ее интенсивность увеличивается в новообразованиях кожи при  $\lambda_{532}$ , но площадь уменьшается при  $\lambda_{785}$ . Линия  $1204\text{ см}^{-1}$ , связанная с белками, в спектрах опухолей смещается в сторону более высоких волновых чисел при  $\lambda_{532}$ ; соответствующая ей площадь увеличивается для обеих длин волн возбуждения (рис. 2).

Полоса  $1537\text{ см}^{-1}$  относится к амиду II [56]. Ее интенсивность для  $\lambda_{532}$  несколько снижается в спектрах ПКК, и она полностью отсутствует в папилломе (рис. 2); при  $\lambda_{785}$  полоса не обнаруживается.

Линия амида III ( $\beta$ -листы) в здоровой коже расположена с центром  $1264\text{ см}^{-1}$ . Согласно литературным данным, его разупорядоченное состояние дает еще одну полосу  $\sim 1245\text{ см}^{-1}$  [10, 28], и данную тенденцию мы наблюдали на спектрах всех образцов опухолей (рис. 2, табл. S2). Полоса  $1264\text{ см}^{-1}$  в спектрах злокачественных новообразований имеет меньшую площадь и ширину (табл. S2). Сдвиг пика в сторону более высоких волновых чисел наблюдался ранее [57] и вызван возникающим нарушением вторичной структуры белков. Еще один пик  $1252\text{ см}^{-1}$  появляется в спектрах БКК для обеих длин волн возбуждения, тогда как в папилломе данный пик виден только при  $\lambda_{785}$ . Возможно, данный пик также отображает вклад неупорядоченного состояния вторичной структуры белков. Полоса  $1264\text{ см}^{-1}$  ранее наблюдалась только в здоровых клетках и отсутствовала в клетках злокачественных новообразований [55]. В нашей работе выраженный пик на  $1264\text{ см}^{-1}$  становится слабее в БКК, ПКК и папилломе, а пик на  $1245\text{ см}^{-1}$  становится более интенсивным. Подобная вариация вторичной структуры белков указывает на изменения структуры кожи при возникновении патологии – например, повышенное содержание фибрина [55, 57].

Полоса амида I с центром  $1654\text{ см}^{-1}$  смещается в сторону меньших волновых чисел в БКК и ПКК и более высоких – в папилломах; ее ширина в опухолях увеличивается для обеих длин волн возбуждения. Подобная тенденция ранее отмечалась в ряде работ [28, 36]. Площадь пика уменьшается в БКК и увеличивается в ПКК и папилломе. Об уменьшении интенсивности полос в БКК ранее сообщалось в работах [58]. Данные изменения можно объяснить тем,

что в норме вторичная структура гистонов представляет собой преимущественно  $\alpha$ -спирали, и их содержание в раковых клетках снижено, или нарушена структура нуклеиновых кислот [55]. Другая полоса амида I,  $1690\text{ см}^{-1}$ , видна только при  $\lambda_{785}$  и в ПКК и папилломе наблюдается увеличение ее ширины и площади.

Колебания C=C, N-H и C-N амида II соответствуют линии  $1553\text{ см}^{-1}$  [59], ширина и площадь которого увеличивается в ПКК и папилломе на  $\lambda_{532}$  (рис. 2, табл. S2). На  $\lambda_{785}$  полоса сужается в спектрах ПКК и папилломы. Данный пик также приписывают триптофану, и авторы в одной из работ [60] наблюдали его увеличение в БКК и ПКК.

Полоса  $1513\text{ см}^{-1}$  была отнесена к каротиноидам [32, 33]. Ее интенсивность увеличивается в спектрах папиллом и снижается в ПКК, оставаясь неизменной в БКК. Несмотря на то, что в одной из работ содержание каротиноидов в БКК было выше, чем в нормальной коже [39], в нашей работе подобной тенденции не наблюдалось. Кроме того, содержание каротиноидов может зависеть от индивидуальных особенностей пациентов, а также от их образа жизни (курение, хроническая усталость, заболевания и т.д.) [42].

Формирование БКК часто связано с изменением формы ядра до овальной или удлинённой с конденсированным хроматином [58, 61]. Уплотнение структуры хроматина, состоящего из ДНК и белков, приводит к сужению полос КР, связанных с ДНК и белками. Согласно спектрам второй производной, сужение наблюдается в полосах  $1030$ ,  $1615$  и  $1655\text{ см}^{-1}$ , соответствующих белкам и ДНК (справедливо для обеих использованных длин волн возбуждения).

В спектрах БКК и ПКК мутации белка p53 в основном относятся к типу C  $\rightarrow$  T и CC  $\rightarrow$  TT, и являются мутациями, спровоцированными ультрафиолетовым (УФ) излучением [62]. Подобный переход может приводить к снижению концентрации C. Площадь полосы  $1260\text{ см}^{-1}$ , которая отражает вклад C, уменьшается в спектрах всех опухолей: БКК, ПКК и папилломы. Полосы КР, отнесенные к T, согласно данным литературы [63] расположены на  $936\text{ см}^{-1}$  (увеличивается в БКК, ПКК);  $1063\text{ см}^{-1}$  (увеличивается в БКК и ПКК);  $1104\text{ см}^{-1}$ ,  $1174\text{ см}^{-1}$ ,  $1489\text{ см}^{-1}$ ,  $1550\text{ см}^{-1}$  (увеличивается в ПКК);  $1232\text{--}1239\text{ см}^{-1}$ ,  $1340\text{ см}^{-1}$  (увеличивается во всех опухолях).

**4. Заключение.** В данной работе была проведена дифференциация новообразований кожи (базальноклеточный рак, плоскоклеточный рак, папиллома) и здоровой кожи путем анализа параметров спектральных полос комбинационного рассеяния света на основе второй производной и лоренцевого приближе-

ния спектров. Установлено, что опухоли кожи могут спровоцировать деформацию вторичной структуры белков, в результате чего полоса на  $972\text{ см}^{-1}$  либо расщепляется на два пика, либо смещается в сторону меньших волновых чисел. Другая полоса, относящаяся к  $\alpha$ -спиралям в белках ( $1655\text{ см}^{-1}$ ), демонстрирует увеличение ширины и площади в ПКК и папилломе и уменьшение – в БКК. Кроме того, в опухолях появляется полоса, соответствующая неупорядоченному состоянию амида III. Подобные изменения содержания  $\alpha$ -спиралей можно объяснить нарушением их молекулярной структуры в опухолях. В то же время в опухолях полосы, отражающие содержание липидов ( $1061$ ,  $1127$ ,  $1297$ ,  $1439$ ,  $1745\text{ см}^{-1}$ ), демонстрируют уширение и/или увеличение площади. Другой особенностью, связанной с липидами, является расщепление полосы на  $1744\text{ см}^{-1}$  на два пика при возбуждении на длине волны  $532\text{ нм}$  и ее значительное уширение при  $785\text{ нм}$ . Нарушение структуры липидов, также обозначенное в нескольких полосах как “красный” сдвиг волновых чисел, наряду с увеличением их содержания, возможно, связано с повышенной текучестью клеточной мембраны.

Исследование спектров папиллом носит предварительный характер и может быть не вполне объективным из-за малого размера выборки. Основной целью работы являлась апробация метода анализа спектров КР с помощью Лоренцева приближения. Результаты применения данного метода для анализа спектров новообразований кожи показали его перспективность для выявления характерных биомаркеров злокачественных новообразований и происходящих изменений в структуре клеток, что может быть основой для дифференциации в ранней диагностике.

**5. Финансирование работы.** Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант # 23-25-00249.

**6. Соблюдение этических стандартов.** Исследование проведено в соответствии с Хельсинкской декларацией и одобрено Межвузовским этическим комитетом Московского государственного медико-стоматологического университета им. Евдокимова Минздрава России (Москва, Россия, код протокола 3, 16.03.2023) для исследований на человеке.

Информированное согласие было получено от всех субъектов, участвовавших в исследовании.

**7. Конфликт интересов.** Конфликт интересов отсутствует.

1. V. V. Tuchin, *Handbook of Optical Biomedical Diagnostics*, 2nd ed., SPIE Press, Bellingham, WA, USA (2016), p. 1410.

2. V. Tuchin, J. Popp, and V. Zakharov, *Multimodal Optical Diagnostics of Cancer*, 1st ed., Springer, Cham, Switzerland (2020), p. 597; <https://doi.org/10.1007/978-3-030-44594-2>.
3. В. П. Захаров, К. В. Ларин, С. В. Козлов, А. А. Моряттов, И. А. Братченко, О. О. Мякинин, Д. Н. Артемьев, Ю. А. Христофорова, *Физика волновых процессов и радиотехнические системы* **16**(3), 73 (2013).
4. С. В. Козлов, В. Захаров, А. А. Моряттов, И. А. Братченко, Д. Н. Артемьев, *Известия Самарского научного центра Российской академии наук* **17**(2–3), 542 (2015).
5. I. A. Bratchenko, D. N. Artemyev, O. O. Myakinin, Y. A. Khristoforova, A. A. Moryatov, S. V. Kozlov, and V. P. Zakharov, *J. Biomed. Opt.* **22**(2), 027005 (2017).
6. I. A. Bratchenko, L. A. Bratchenko, A. A. Moryatov, Y. A. Khristoforova, D. N. Artemyev, O. O. Myakinin, A. E. Orlov, S. V. Kozlov, and V. P. Zakharov, *Experimental Dermatology* **30**(5), 652 (2021).
7. A. N. Bashkatov, V. P. Zakharov, A. B. Bucharskaya, E. G. Borisova, Y. A. Khristoforova, E. A. Genina, V. V. Tuchin, *Optical Diagnostics of Cancer* **3**, 106 (2020).
8. R. Haydock, *Multivariate Analysis of Raman Spectroscopy Data. Ph. D. Thesis*, University of Nottingham, Nottingham, UK, December (2015).
9. A. Synytsya, M. Judexova, D. Hoskovec, M. Miskovicova, and L. Petruzzelka, *J. Raman Spectrosc.* **45**, 903 (2014); <https://doi.org/10.1002/jrs.4581>.
10. I. Matveeva, I. Bratchenko, Y. Khristoforova, L. Bratchenko, A. Moryatov, S. Kozlov, O. Kaganov, and V. Zakharov, *Sensors* **22**, 9588 (2022); <https://doi.org/10.3390/s22249588>.
11. M. Larion, T. Dowdy, V. Ruiz-Rodado, M. W. Meyer, H. Song, W. Zhang, D. Davis, M. R. Gilbert, and A. Lita, *Biosensors* **9**, 5 (2019); <https://doi.org/10.3390/bios9010005>.
12. A. N. Kuzmin, A. Pliss, A. Rzhhevskii, A. Lita, and M. Larion, *Biosensors* **8**, 106 (2018); <https://doi.org/10.3390/bios8040106>.
13. G. F. Silveira, D. M. Strottmann, L. de Borba, D. S. Mansur, N. I. T. Zanchin, and J. Bordignon, *Clin. Exp. Immunol.* **183**(1), 114 (2016); <https://doi.org/10.1111/cei.12701>.
14. M. D. Keller, E. M. Kanter, and A. Mahadevan-Jansen, *Spectroscopy* **21**(11), 33 (2006).
15. M. A. Short, H. Lui, D. McLean, H. Zeng, A. Alajlan, and X. K. Chen, *J. Biomed. Opt.* **11**(3), 034004 (2006); <https://doi.org/10.1117/1.2209549>.
16. E. Rimskaya, S. Shelygina, A. Timurzieva, I. Saraeva, E. Perevedentseva, N. Melnik, K. Kudrin, D. Reshetov, and S. Kudryashov, *Int. J. Mol. Sci.* **24**, 14748 (2023); <https://doi.org/10.3390/ijms241914748>.
17. A. Cios, M. Ciepielak, L. Szymanski, A. Lewicka, S. Cierniak, W. Stankiewicz, M. Mendrycka, and S. Lewicki, *Int. J. Mol. Sci.* **22**, 2437 (2021); <https://doi.org/10.3390/ijms22052437>.
18. I. Saraeva, D. Zayarny, E. Tolordava, A. Nastulyavichus, R. Khmelitsky, D. Khmelenin, S. Shelygina, and S. Kudryashov, *Chemosensors* **11**(7), 361 ((2023)); <https://doi.org/10.3390/chemosensors11070361>.
19. I. Saraeva, E. Tolordava, S. Sheligyna, A. Nastulyavichus, R. Khmelitskii, N. Pokryshkin, D. Khmelenin, S. Kudryashov, A. Ionin, and A. Akhmatkhanov, *Int. J. Mol. Sci.* **24**(6), 5119 (2023); <https://doi.org/10.3390/ijms24065119>.
20. X. Lu, Q. Liu, J. A. Benavides-Montano, A. V. Nicola, D. E. Aston, B. A. Rasco, and H. C. Aguilar, *J. Virol.* **87**(6), 3130 2013; <https://doi.org/10.1128/jvi.03220-12>.
21. A. O'Grady, A. C. Dennis, D. Denvir, J. J. McGarvey, and S. E. Bell, *Anal. Chem.* **73**(9), 2065 (2001).
22. M. N. Kinalwa, E. W. Blanch, and A. J. Doig, *Anal. Chem.* **82**(15), 6347 (2010).
23. C. A. Tellez Soto, L. P. Medeiros-Neto, L. dos Santos, A. B. Santos, I. Ferreira, P. Singh, R. Canevari, and A. A. Martin, *J. Raman Spectrosc.* **49**(7), 1165 (2018); <https://doi.org/10.1002/jrs.5370>.
24. C. E. E. Grace, M. B. Mary, S. Vaidyanathan, and S. Srisudha, *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* **270**, 120830 (2022).
25. L. Chrit, X. S. Hadjur, C. Morel, G. Sockalingum, G. Lebourdon, F. Leroy, and M. Manfait, *J. Biomed. Opt.* **10**(4), 044007 (2005).
26. C. A. Tellez-Soto, M. G. P. Silva, L. dos Santos, T. D. O. Mendes, P. Singh, S. A. Fortes, P. Favero, and A. A. Martin, *Vib. Spectrosc.* **112**, 103196 (2021).
27. J. Zhao, H. Lui, D. I. McLean, and H. Zeng, *Appl. Spectrosc.* **61**(11), 1225 (2007).
28. X. Feng, A. J. Moy, H. T. Nguyen, J. Zhang, M. C. Fox, K. R. Sebastian, J. S. Reichenberg, M. K. Markey, and J. W. Tunnell, *Biomed. Opt. Express* **8**, 2835 (2017); <https://doi.org/10.1364/BOE.8.002835>.
29. P. J. Caspers, G. W. Lucassen, R. Wolthuis, H. A. Bruining, and G. J. Puppels, *Biospectroscopy* **4**(4S), S31 (1998); [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1520-6343\(1998\)4:5+<S31::AID-BSPY4>3.0.CO;2-M/](https://doi.org/10.1002/(SICI)1520-6343(1998)4:5+<S31::AID-BSPY4>3.0.CO;2-M/)
30. M. Gniadecka, P. A. Philipsen, S. Sigurdsson, O. F. Nielsen, D. H. Christensen, J. Hercogova, K. Rossen, H. K. Thomsen, and L. K. Hansen, *J. Investig. Dermatol.* **122**, 443 (2004); <https://doi.org/10.1046/j.0022-202X.2004.22208.x>.
31. J. Anastassopoulou, M. Kyriakidou, E. Malesiou, M. Rallis, and T. Theophanides, *Infrared and Raman Spectroscopic Studies of Molecular Disorders in Skin Cancer* **33**, 567 (2019); <https://doi.org/10.21873/invivo.11512>.

32. M.E. Darvin, W. Sterry, J. Lademann, and T. Vergou, *The Role of Carotenoids in Human Skin.Molecules* **16**, 10491 (2011); <https://doi.org/10.3390/molecules161210491>.
33. A. Morovati, M.A. Ansari, and V.V. Tuchin, *J. Biophotonics* **13**, e202000124 (2020); <https://doi.org/10.1002/jbio.202000124>.
34. K. Maquelin, C. Kirschner, L.P. Choo-Smith, N. van der Braak, H.P. Endtz, D. Naumann, and G.J. Puppels, *J. Microbiol. Methods* **51**, 255 (2002); [https://doi.org/10.1016/S0167-7012\(02\)00127-6](https://doi.org/10.1016/S0167-7012(02)00127-6).
35. S. Bashir, H. Nawaz, M.I. Majeed, M. Mohsin, S. Abdullah, S. Ali, N. Rashid, M. Kashif, F. Batool, M. Abubakar, S. Ahmad, and A. Abdulraheem, *Photodiagn. Photodyn. Ther.* **34**, 102280 (2021); <https://doi.org/10.1016/j.pdpdt.2021.102280>.
36. Y. Choi, J.W. Yoon, J.K. Hong, Y. Ryu, and S.H. Song, *Commun. Phys.* **3**, 1 (2020); <https://doi.org/10.1038/s42005-020-00409-y>.
37. Y. Chen, J. Dai, X. Zhou, Y. Liu, W. Zhang, and G. Peng, *PLoS One* **9**(4), e93906 (2014); <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0093906>.
38. G.F. Silveira, D.M. Strottmann, L. de Borba, D.S. Mansur, N.I.T. Zanchin, J. Bordignon, C.N. Duarte dos Santos, **183**(1), 114 (2016); <https://doi.org/10.1111/cei.12701>
39. S. Tfaili, C. Gobinet, G. Josse, J.F. Angiboust, M. Manfait, and O. Piot, *Analyst* **137**, 3673 (2012); <https://doi.org/10.1039/C2AN16292J>.
40. Y. Li, Z.N. Wen, L.J. Li, M.L. Li, N. Gao, and Y.Z. Guo, *J. Raman Spectrosc.* **41**, 142 (2010); <https://doi.org/10.1002/jrs.2421>.
41. S. Rauniyar, K. Pansare, A. Sharda, S.R. Singh, P. Saha, M.K. Chilakapati, and S. Gupta, *ACS Omega* **8**(6), 5522 (2023); <https://doi.org/10.1021/acsomega.2c06787>.
42. N. Kourkoumelis, I. Balatsoukas, V. Moulia, A. Elka, G. Gaitanis, and I.D. Bassukas, *Int. J. Mol. Sci.* **16**, 14554 (2015); <https://doi.org/10.3390/ijms160714554>.
43. M. Kashif, M.I. Majeed, M.A. Hanif, and A. ur Rehman, *Spectrochim. Acta A Mol. Biomol. Spectrosc.* **242**, 118729 (2020); <https://doi.org/10.1016/j.saa.2020.118729>.
44. X.Y. Liu, P. Zhang, L. Su, L.M. Wang, X.D. Wei, H.Q. Wang, and T.F. Lin, *J. Nanosci. Nanotechnol.* **18**, 6776 (2018); <https://doi.org/10.1166/jnn.2018.15510>.
45. R. Vyumvuhore, A. Tfylyi, H. Duplan, A. Delalleau, M. Manfait, and A. Baillet-Guffroy, *Analyst* **138**, 4103 (2013); <https://doi.org/10.1039/C3AN00716B>.
46. D. Lunter, V. Klang, D. Kocsis, Z. Varga-Medveczky, S. Berko, and F. Erdo, *Experimental Dermatology* **31**(9), 1311 (2022); <https://doi.org/10.1111/exd.14645>.
47. P. Rekha, P. Aruna, E. Brindha, D. Koteeswaran, M. Baludavid, and S. Ganesan, *J. Raman Spectrosc.* **47**(7), 763 (2016); <https://doi.org/10.1002/jrs.4897>.
48. V. Ratushny, M.D. Gober, R. Hick, T.W. Ridky, and J.T. Seykora, *J. Clin. Investig.* **122**(2), 464 (2012); <https://doi.org/10.1172/JCI57415>.
49. R. Vilar, R.J. Fish, and A. Casini, *Haematologica* **105**(2), 284 (2020); <https://doi.org/10.3324/haematol.2019.236901>.
50. A. Collen, S.M. Smorenburg, E. Peters, F. Lupu, P. Koolwijk, C. van Noorden, and V.W. van Hinsbergh, *Cancer Res.* **60**, 6196 (2000).
51. H.F. Dvorak, D.R. Senger, and A.M. Dvorak, *Cancer Metastasis Rev.* **2**, 41 (1983); <https://doi.org/10.1007/BF00046905>.
52. T.M. Niers, L.W. Bruggemann, C.P. Klerk, F.J.M. Muller, T. Buckle, P.H. Reitsma, D.J. Richel, C.A. Spek, O. van Tellingen, and C.J.F. van Noorden, *Clinical & Experimental Metastasis* **26**, 171 (2009); <https://doi.org/10.1007/s10585-008-9227-6>.
53. Z.Q. Wen, X. Cao, and A. Vance, *J. Pharm. Sci.* **97**, 2228 (2008); <https://doi.org/10.1002/jps.21191>.
54. H. Jayan, H. Pu, and D.W. Sun, *Spectrochim. Acta, Part A* **276**, 121217 (2022); <https://doi.org/10.1016/j.saa.2022.121217>.
55. Y. Chen, J. Dai, X. Zhou, Y. Liu, W. Zhang, and G. Peng, *PLoS One* **9**(4), e93906 (2014); <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0093906>.
56. A. Fălămaș, S.A. Cinta-Pinzaru, C. Dehelean, C.H. Krafft, and J. Popp, *Rom. J. Biophys* **20**(1), 1 (2010).
57. N. Kourkoumelis, I. Balatsoukas, V. Moulia, G. Gaitanis, and I.D. Bassukas, *Int. J. Mol. Sci.* **16**, 14554 (2015); <https://doi.org/10.3390/ijms160714554>.
58. M. Gniadecka, H.C. Wulf, N. Nymark Mortensen, O. Faurskov Nielsen, and D.H. Christensen, *J. Raman Spectrosc.* **28**, 125 (1997); [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1097-4555\(199702\)28:2/3<125::AID-JRS65>3.0.CO;2-%23](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-4555(199702)28:2/3<125::AID-JRS65>3.0.CO;2-%23).
59. D. Predoi, S.L. Iconaru, M. Albu, C.C. Petre, and G. Jiga, *Polym. Eng. Sci.* **57**, 537 (2017); <https://doi.org/10.1002/pen.24553>.
60. C.A. Lieber, S.K. Majumder, D. Billheimer, D.L. Ellis, and A. Mahadevan-Jansen, *J. Biomed. Opt.* **13**, 024013 (2008); <https://doi.org/10.1117/1.2899155>.
61. E.B. Souto, R. da Ana, V. Vieira, J.F. Figueiro, J. Dias-Ferreira, A. Cano, A. Zielinska, A.M.Silva, R. Staszewski, and J. Karczewski, *Neoplasia* **30**, 100810 (2022); <https://doi.org/10.1016/j.neo.2022.100810>.
62. S. Bolshakov, C.M. Walker, S.S. Strom, M.S. Selvan, G.L. Clayman, A. El-Naggar, S.M. Lippman, M.L. Kripke, and H.N. Ananthaswamy, *Clinical Cancer Research* **9**(1), 228 (2003).
63. N. Leopold, S. Cinta-Pinzaru, M. Baia, E. Antonescu, O. Cozar, W. Kiefer, and J. Popp, *Vib. Spectrosc.* **39**(2), 169 (2005); <https://doi.org/10.1016/j.vibspec.2005.02.019>.

*Devoted to memory of Alexei Alexandrovich Starobinsky*  
**De Sitter local thermodynamics in  $f(\mathcal{R})$  gravity**

G. E. Volovik<sup>1)</sup>

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

*Landau Institute for Theoretical Physics, 142432 Chernogolovka, Russia*

Submitted 19 December 2023

Resubmitted 16 February 2024

Accepted 28 February 2024

DOI: 10.31857/S1234567824070140, EDN: BMFBAM

The  $f(\mathcal{R})$  gravity in terms of the Ricci scalar  $\mathcal{R}$  is one of the simplest geometrical models, which describes the dark energy and de Sitter expansion of the Universe [1–7]. It was used to construct an inflationary model of the early Universe – the Starobinsky inflation, which is controlled by the  $\mathcal{R}^2$  contribution to the effective action. This class of models was also reproduced in the so-called  $q$ -theory [8], where  $q$  is the 4-form field introduced by Hawking [9] for the phenomenological description of the physics of the deep (ultraviolet) vacuum. The Starobinsky model is in good agreement with the observations, although it is difficult to embed the model into a ultraviolet (UV) complete theory [10–12].

In this paper we consider the de Sitter stage of the expansion of the Universe, and use the  $f(\mathcal{R})$  gravity for the general consideration of the local thermodynamics of the de Sitter state. The term “local” means that we consider the de Sitter vacuum as the thermal state, which is characterized by the local temperature. This consideration is based on observation, that matter immersed in the de Sitter vacuum feels this vacuum as the heat bath with the local temperature  $T = H/\pi$ , where  $H$  is the Hubble parameter. This temperature is twice larger than the Gibbons–Hawking one, and it has no relation to the cosmological horizon. The existence of the local temperature suggests the existence of the other local thermodynamic quantities, which participate in the local thermodynamics of the de Sitter state. They include the entropy density  $s$ , the vacuum energy density  $\epsilon$  and the thermodynamic variables related to the gravitational degrees of freedom. In the  $f(\mathcal{R})$  theory these are the thermodynamically conjugate variables [13, 14] – the scalar curvature  $\mathcal{R}$  and the effective gravitational coupling  $K = df/d\mathcal{R}$  (the inverse Newton constant,  $K = 1/16\pi G$ ).

Example of the influence of the de Sitter vacuum to the matter immersed into this vacuum is provided by an atom in the de Sitter environment. As distinct from the atom in the flat space, the atom in the de Sitter vacuum has a certain probability of ionization. The rate of ionization is similar to the rate of ionization in the Minkowski spacetime in the presence of the thermal bath with temperature  $T = H/\pi$  [15–17]. The same temperature determines the other activation processes, which are energetically forbidden in the Minkowski vacuum, but are allowed in the de Sitter background, see also [18, 19]. That is why it is natural to consider the temperature  $T = H/\pi$  as the local temperature of the de Sitter vacuum. Although the local temperature is twice larger than the Gibbons–Hawking temperature assigned to the horizon,  $T_{\text{GH}} = H/2\pi$ , there is the certain connection between the local thermodynamics and the thermodynamics of the event horizon. Using the local thermodynamics with  $T = H/\pi$ , we obtained the general result for the total entropy inside the horizon. The total entropy of the volume  $V_H$  bounded by the cosmological horizon coincides with the Gibbons–Hawking entropy assigned to the horizon,  $S_{\text{bulk}} = sV_H = 4\pi KA = S_{\text{GH}}$ , where  $K = df/d\mathcal{R}$ . The connection between the bulk entropy of the Hubble volume,  $S_{\text{bulk}}$ , and the surface entropy of the cosmological horizon,  $S_{\text{GH}}$ , suggests the bulk-surface correspondence of the holographic origin [20–22].

It is not excluded that our Universe is finite. Its volume  $V$  might be comparatively small, not much larger than the currently observed Hubble volume  $V_H$  [23]. Then, if the de Sitter state represents the excited thermal state of the quantum vacuum, the thermal fluctuations of the deep quantum vacuum become important. The local thermodynamics of the de Sitter state demonstrates that the relative magnitude of thermal fluctuations of the vacuum energy density  $\epsilon_{\text{vac}}$  is determined

<sup>1)</sup>e-mail: grigori.volovik@aalto.fi



by the ratio of the Hubble volume to the volume of the Universe:

$$\frac{\langle(\Delta\epsilon_{\text{vac}})^2\rangle}{\langle\epsilon_{\text{vac}}\rangle^2} \sim \frac{V_H}{V}. \quad (1)$$

Since the de Sitter state serves as the thermal bath for matter, the de Sitter quantum vacuum may have its own temperature [24], which can be different from the temperature of the matter degrees of freedom [25]. The initially empty pure de Sitter state becomes locally unstable towards the creation of thermal matter from the vacuum by thermal activation. The process of the thermalization of matter transforms the de Sitter state to the quasi-equilibrium state of the expanding Universe, which is characterized by two different temperatures: the temperature of the gravitational vacuum and the temperature of matter. To describe the decay of the vacuum due to activation and thermalization of matter, the extension of the Starobinsky analysis of the vacuum decay [26–29] is needed. We provide the simple phenomenological model of the thermal exchange between the vacuum and the excited matter, which leads to the following time dependence of the energy densities of vacuum and matter:

$$\epsilon_{\text{vac}} \sim M_{\text{P}}^4 \left(\frac{t_{\text{P}}}{t+t_0}\right)^{2/3}, \quad \epsilon_M \sim H^4 \sim M_{\text{P}}^4 \left(\frac{t_{\text{P}}}{t+t_0}\right)^{4/3}. \quad (2)$$

Here  $M_{\text{P}}$  is the Planck mass,  $M_{\text{P}}^2 = K$ , and  $t_{\text{P}} = 1/M_{\text{P}}$  is Planck time. The obtained power law decay of  $H$  agrees with that found in [30–34]. The parameter  $t_0$  is related to the initial value of the Hubble parameter at the beginning of inflation,  $t_0 \sim E_{\text{P}}^2/H_{t=0}^3$ . It is called the quantum breaking time of space-times with positive cosmological constant [35, 36].

**Funding.** This work has no funding.

**Conflict of interest.** The author of this work declares that he has no conflicts of interest.

This is an excerpt of the article “De Sitter local thermodynamics in  $f(R)$  gravity”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364024600526

1. A. A. Starobinsky, Phys. Lett. B **91**, 99 (1980).
2. A. A. Starobinsky, JETP Lett. **86**, 157 (2007).
3. A. D. Felice and S. Tsujikawa, Living Reviews in Relativity **13**, 3 (2010).
4. T. Clifton, P. G. Ferreira, A. Padilla and C. Skordis, Phys. Rept. **513**, 1 (2012).
5. S. Nojiri and S.D. Odintsov, Phys. Rep. **505**, 59 (2011).
6. S. Nojiri, S.D. Odintsov, and V.K. Oikonomou, Phys. Rept. **692**, 1 (2017).
7. S.D. Odintsov, V.K. Oikonomou, I. Giannakoudi, F.P. Fronimos, and E.C. Lymperiadou, Symmetry **15**, 1701 (2023).
8. F.R. Klinkhamer and G.E. Volovik, JETP Lett. **88**, 289 (2008).
9. S.W. Hawking, Phys. Lett. B **134**, 403 (1984).
10. M. Chaichian, A. Ghal’e, and M. Oksanen, Phys. Rev. D **107**, 023527 (2023).
11. M. Brinkmann, M. Cicolic and P. Zito, JHEP **2023**, 38 (2023).
12. D. Lüst, J. Masias, B. Muntz, and M. Scalisi, arXiv:2312.13210.
13. G.E. Volovik, JETP Lett. **118**, 282 (2023).
14. G.E. Volovik, JETP Lett. **118**, 531 (2023).
15. G.E. Volovik, JETP Lett. **90**, 1 (2009).
16. G.E. Volovik, JETP Lett. **118**, 8 (2023).
17. H. Maxfield and Z. Zahraee, JHEP **11**, 093 (2022).
18. N. Arkani-Hamed and J. Maldacena, arXiv:1503.08043.
19. M. Reece, L.-T. Wang, and Zh.-Zh. Xianyu, Phys. Rev. D **107**, L101304 (2023).
20. J.D. Bekenstein, Phys. Rev. D **23**, 287 (1981).
21. V. Narovlansky and H. Verlinde, arXiv:2310.16994.
22. A. Milekhin and J. Xu, arXiv:2312.03623.
23. J.-L. Lehners and J. Quintin, Phys. Lett. B **850**, 138488 (2024).
24. T. Padmanabhan, Int. J. Mod. Phys. D **29**, 2030001 (2020).
25. S.N. Vergeles, arXiv:2301.01692
26. A.A. Starobinsky and J. Yokoyama, Phys. Rev. D **50**, 6357 (1994).
27. D. Polarski and A.A. Starobinsky, Class. Quantum Grav. **13**, 377 (1996).
28. L. Kofman, A. Linde, and A.A. Starobinsky, Phys. Rev. D **56**, 3258 (1997).
29. H. Jeong, K. Kamada, A.A. Starobinsky, and J. Yokoyama, JCAP **11**, 023 (2023).
30. T. Padmanabhan, Phys. Rep. **380**, 235 (2003).
31. T. Markkanen, Eur. Phys. J. C **78**, 97 (2018).
32. M. Fairbairn, T. Markkanen, and D. Rodriguez Roman, Eur. Phys. J. C **78**, 347 (2018).
33. D. Rodriguez Roman, *Gravitational particle creation in the early universe*, PhD Thesis, King’s College, London (2020).
34. J.-O. Gong and M.-S. Seo, JCAP **10**, 042 (2021).
35. G. Dvali and C. Gomez, Fortschr. Phys. **67**, 1800092 (2019).
36. L. Berezhiani, G. Dvali, and O. Sakhelashvili, Phys. Rev. D **105**, 025022 (2022).

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

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

**том 119**

Выпуск 8

25 апреля 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>**

---

© Российская академия наук, 2024

© Редакция журнала “Письма в ЖЭТФ” (составитель), 2024

# Ленты эллипсов поляризации в непараксиальных оптических полях (Мини-обзор)

К. С. Григорьев, Н. Ю. Кузнецов, В. А. Макаров<sup>1)</sup>

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

Поступила в редакцию 9 марта 2024 г.

После переработки 9 марта 2024 г.

Принята к публикации 11 марта 2024 г.

Приведен краткий обзор выполненных в последние пять лет научных работ, посвященных описанию особенностей возникающих в пространстве нетривиальных топологических трехмерных структур электромагнитного поля – оптических лент, образуемых векторами, характеризующими размеры и ориентацию эллипса поляризации светового поля, при отслеживании изменения ориентации этих векторов вдоль замкнутых контуров различной формы, сцепленных с линиями сингулярности поляризации или расположенными в непосредственной близости от них. Описаны характеристики лент поляризации, построенных на произвольно ориентированных круговых контурах малых размеров, окружающих единичную линию сингулярности круговой поляризации электромагнитного поля. Обсуждается топология лент поляризации света, рассеянного диэлектрической сферой и металлическим сфероидом субволновых размеров при падении на них плоских эллиптически поляризованных гармонических волн. Описаны оптические ленты поляризации, существующие в фокальной области параболического зеркала при острой фокусировке падающих на него лазерных пучков различного типа. Обсуждается топология лент эллипсов поляризации в электромагнитном поле лазерного излучения, распространяющегося в планарном метаматериале.

DOI: 10.31857/S1234567824080019, EDN: ANFKQQ

**Введение.** В 2005 году Айзек Фройнд предсказал [1] возможность управления поляризацией света, в результате которой происходит сворачивание поверхностей, образуемых характеризующими эллипс поляризации векторами при их прослеживании вдоль различно ориентируемых в пространстве замкнутых кривых, в различные геометрические фигуры: конусы, спирали, ленты Мебиуса и т.д. Спустя десять лет оптические ленты Мебиуса были экспериментально обнаружены в жестко сфокусированном излучении, поперечный профиль которого предварительно был специальным образом сконструирован при помощи жидкокристаллического устройства [2]. Позднее в схемах с жесткой фокусировкой излучения был продемонстрирован способ создания экзотических оптических лент Мебиуса, характеризующих поляризацию света векторов с переменной скоростью скручивания [3] и показана возможность генерации сложных топологических структур света путем управления сингулярностями поляризации в формируемых непараксиальных световых полях [4]. Недавние теоретические исследования [5] показывают, что при изменении эксцентриситета, азимутальной ориентации или центрирования траектории, используемой для

построения ленты, может меняться количество ее оборотов. Непараксиальные электромагнитные поля, содержащие ленты Мебиуса, могут быть образованы не только путем жесткой фокусировки излучения, но и простым скрещиванием параксиальных световых пучков [6].

Необходимая для генерации оптических лент современная экспериментальная техника позволяет в настоящее время получать лазерные пучки, состояние поляризации света в которых имеет сложную пространственную структуру. В частности, при помощи различных методик, включая спиральные фазовые пластинки, конические линзы [7] и зеркала [8], голографические пластины [9, 10], оптические элементы Панчаратнама–Берри [11, 12], создаются световые пучки, пространственные распределения характеризующих эллипс поляризации векторов в которых имеют достаточно сложную форму. Это позволяет генерировать и исследовать трехмерные распределения эллипсов поляризации света в случае, когда они не лежат в параллельных плоскостях. Примерами таких структур являются конфигурации сингулярных линий фазы, образующих в пространстве нетривиальные узлы [13–15], а также упомянутые выше оптические ленты Мебиуса [2, 5, 16–18].

<sup>1)</sup>e-mail: vamakarov@phys.msu.ru

Более простыми топологическими структурами, в то же время тесно связанными с оптическими лентами, являются точки сингулярности поляризации светового поля. В таких точках один или несколько параметров, задающих форму и ориентацию эллипса поляризации распространяющегося излучения, становятся неопределенными [19]. Картины эллипсов поляризации, формируемые в окрестности таких точек, являются устойчивыми по отношению к малым возмущениям электромагнитного поля и обладают рядом схожих особенностей [4, 19–23]. В общем случае в непараксиальных электромагнитных полях точки пространства, в которых эллипс поляризации вырождается в окружность ( $C$ -точки), образуют изолированные кривые –  $C$ -линии, а точки пространства, в которых излучение линейно поляризовано ( $L$ -точки), – образуют  $L$ -линии [24]. В точках  $C$ -линии ориентации окружностей в пространстве, по которым движется конец вектора напряженности электрического поля, необязательно одинаковы. В непараксиальных электромагнитных полях, для характеристики сингулярностей поляризации используются параметры изотропии  $C$ - и  $L$ -точек. Они обобщают широко используемый при исследовании точек сингулярности поляризации параксиальных световых полей топологический индекс поляризационной сингулярности, равный нормированному на  $2\pi$  изменению угла поворота главной оси эллипса поляризации при обходе точки сингулярности по замкнутому контуру малого радиуса, лежащему в плоскости перпендикулярной направлению распространения излучения. Параметры изотропии совпадают по знаку с топологическими индексами паттернов, образуемых проекциями эллипсов поляризации вблизи точек сингулярности на специально выбранную плоскость. Для точек сингулярности круговой поляризации эта плоскость совпадает с плоскостью вращения вектора напряженности электрического поля, а для точек сингулярности линейной поляризации она перпендикулярна направлению, колебаний этого вектора.

Несмотря на возрастающее в последнее время количество теоретических работ, посвященных разнообразным вариантам оптических лент и их трансформациям [1, 5, 16–18, 25–30], а также развитию экспериментальных методов, позволяющих наблюдать оптические ленты [2, 6, 31, 32], создание строгой классификации лент и нахождение однозначной связи их характеристик с параметрами электромагнитного поля и геометрией контуров построения к настоящему моменту находятся в зачаточном состоянии, и работы в этом направлении практически единич-

ны. В [16] показано, что оптические ленты векторов главных осей эллипса поляризации, прослеженных при движении вдоль окружности исчезающе малого радиуса, имеют топологию листа Мебиуса только в том случае, когда данная окружность охватывает точку сингулярности поляризации, лежащую в плоскости контура построения ленты. В [27, 30] была установлена связь числа  $C$ -линий, охватываемых окружностью, вдоль которой строится лента связанных с эллипсом поляризации векторов, с числом полных оборотов, которые совершает соответствующий вектор вокруг контура построения, и показано, что это число всегда принимает полуцелые значения если число охватываемых  $C$ -линий нечетно. Авторы [33] утверждают, что при жесткой фокусировке пучков, содержащих сингулярности круговой поляризации, генерируются ленты Мебиуса, вид которых зависит от топологического индекса  $C$ -точки и направления вращения в ней вектора напряженности электрического поля. В [34] теоретически и численно показано, что при жесткой фокусировке светового пучка, изначально содержащего линии сингулярности круговой поляризации, в отдельных случаях вместо  $C$ -линий образуются  $C$ -точки, вокруг которых вращаются оси эллипсов поляризации, образуя в трехмерном пространстве ленты, имеющие топологию листа Мебиуса. В работе [29] было показано, что при произвольной ориентации контура построения оптической ленты относительно  $C$ -линии, число ее перекручиваний почти всегда равно  $1/2$ , а направление перекручивания обусловлено тем, как контур построения ленты ориентирован относительно плоскости, в которой преимущественно лежат эллипсы поляризации светового поля. Малые отклонения эллипсов от этой плоскости не влияют на число перекручиваний оптической ленты. Однако ленты эллипсов поляризации, описанные в ранних работах [1, 16] и экспериментально обнаруженные в [2], строились на контурах, лежащих в плоскости, в которой движется конец вектора напряженности электрического поля в точке сингулярности круговой поляризации. При этом их авторы обращают внимание на наличие в этом случае лент не только с числом перекручиваний, равным  $1/2$ , но и с числом перекручиваний, равным  $3/2$ .

Классическим способом получения оптических лент в полях электромагнитного излучения, обладающих достаточно большой продольной компонентой, является предложенная в [1, 18] схема с перекрытием двух пучков с различной круговой поляризацией, один из которых имеет фазовую сингулярность. Ленты могут наблюдаться при острой фокусировке пуч-

ков Пуанкаре [32], а также в некоторых задачах рассеяния света [25, 26]. В работах [26, 28] исследована связь топологии оптических лент, образуемых задающими эллипс поляризации векторами, с расположением и ориентацией контура их построения относительно топологического каркаса линий сингулярности поляризации (совокупности всех  $C$ - и  $L$ -линий) лазерного излучения, рассеянного металлической и диэлектрической частицами субволнового размера. Показано, что поверхности, заметаемые векторами осей эллипса поляризации при его прослеживании вдоль замкнутого контура, имеют топологию лент Мебиуса тогда и только тогда, когда их контуры построения сцеплены с  $C$ -линиями поля с нечетным коэффициентом зацепления.

Ниже описаны характеристики лент поляризации, построенных на произвольно ориентированных круговых контурах малых размеров, окружающих уединенную линию сингулярности круговой поляризации электромагнитного поля [29]. Обсуждается топология лент поляризации света, рассеянного диэлектрической сферой и металлическим сфероидом субволновых размеров при падении на них плоских эллиптически поляризованных гармонических волн [26, 28]. Описаны оптические ленты поляризации, существующие в фокальной области параболического зеркала при острой фокусировке падающих на него лазерных пучков различного типа [35]. Обсуждается топология лент эллипсов поляризации в электромагнитном поле лазерного излучения, распространяющегося в планарном метаматериале [36].

**2. Параметры эллипсов поляризации в непараксиальных оптических полях. Линии сингулярности круговой поляризации. Определение и основные свойства лент, образуемых эллипсами поляризации.** Напряженность полностью поляризованного электрического поля монохроматического света с частотой  $\omega$  в любой точке пространства, задаваемой радиус-вектором  $\mathbf{r} = (x, y, z)$ , может быть представлена в виде  $\text{Re}\{\mathbf{E}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t)\}$ , где комплексная амплитуда  $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_R + i\mathbf{E}_I$ . За один период колебаний поля конец вектора напряженности в общем случае описывает эллипс, лежащий в плоскости действительных векторов  $\mathbf{E}_R$  и  $\mathbf{E}_I$ . Нормаль к ней коллинеарна вектору  $\mathbf{N} = 0.5i[\mathbf{E} \times \mathbf{E}^*]$ . Направления полуосей эллипса поляризации удобно описывать при помощи директоров (двунаправленных векторов) его большой и малой осей  $\overleftrightarrow{\mathbf{A}} = \{\mathbf{A}, -\mathbf{A}\}$  и  $\overleftrightarrow{\mathbf{B}} = \{\mathbf{B}, -\mathbf{B}\}$ , где взаимно перпендикулярные векторы  $\mathbf{A} = \text{Re}\{\mathbf{E}^* \sqrt{(\mathbf{E} \cdot \mathbf{E})/|\mathbf{E} \cdot \mathbf{E}|}\}$  и

$\mathbf{B} = \text{Im}\{\mathbf{E}^* \sqrt{(\mathbf{E} \cdot \mathbf{E})/|\mathbf{E} \cdot \mathbf{E}|}\}$  параллельны большой и малой осям эллипса поляризации. Директоры  $\overleftrightarrow{\mathbf{A}}$  и  $\overleftrightarrow{\mathbf{B}}$  являются неупорядоченными парами противоположно направленных векторов и тождественны сами себе при повороте на  $180^\circ$ . Вид эллипса поляризации в рассматриваемой точке пространства также ярко характеризует его степень эллиптичности  $M = 2|\mathbf{A}||\mathbf{B}|/(|\mathbf{A}|^2 + |\mathbf{B}|^2)$ , которая равна единице в случае циркулярно поляризованного излучения ( $C$ -точка) и нулю в случае линейно поляризованного излучения ( $L$ -точка).

При дополнительном не ограничивающем общности требовании коллинеарности векторов  $[\mathbf{A} \times \mathbf{B}]$  и  $\mathbf{N}$ , комплексную амплитуду электрического поля  $\mathbf{E}$  можно записать в виде:  $\mathbf{E} = (\mathbf{A} + i\mathbf{B})e^{i\epsilon}$ , где  $\epsilon = \arg(\sqrt{\mathbf{E} \cdot \mathbf{E}})$  – выпрямляющая фаза. В силу неоднозначности извлечения комплексного корня, выпрямляющая фаза  $\epsilon$  определена с точностью до  $\pi$ , а векторы  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$  – с точностью до одновременной смены знака, что соответствует симметрии эллипса относительно поворота на  $180^\circ$ . В случае, когда  $(\mathbf{E} \cdot \mathbf{E}) = 0$ , эллипс поляризации вырождается в окружность, что делает определение  $\epsilon$ ,  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$  невозможным. Комплексное равенство  $(\mathbf{E} \cdot \mathbf{E}) = 0$  приводит к двум условиям, задающим в трехмерном пространстве изолированные  $C$ -линии, вдоль которых излучение имеет чисто круговую поляризацию.

В трехмерном пространстве  $C$ - и  $L$ -линии могут иметь достаточно сложную форму, образуя, в частности, торические узлы различного типа. Их можно представить в виде тонких эластичных нитей с сомкнутыми концами. Два и более непересекающихся узлов образуют зацепление, характеризующее их коэффициентом зацепления. При изменении параметров падающего излучения, среды, оптических элементов и т.д. может происходить деформация линий сингулярности поляризации электрического поля, их сближение, а затем – пересечение двух линий, в результате которого происходит их пересоединение (разрыв линий в точке пересечения с последующим мгновенным соединением образовавшихся частей в иную, отличающуюся от первоначальной, комбинацию их частей). Результатом такого пересоединения может быть возникновение нового, либо исчезновение или изменение коэффициента имеющегося зацепления.

Рассмотрим некоторую точку на  $C$ -линии и обозначим комплексную амплитуду электрического поля в ней за  $\mathbf{E}_0$ . Совместим с этой точкой начало декартовой системы координат и направим ее оси  $x$ ,  $y$  и  $z$  вдоль трех взаимно перпендикулярных векторов  $\text{Re}\mathbf{E}_0$ ,  $\text{Im}\mathbf{E}_0$  и  $\mathbf{N}_0 = 0.5i[\mathbf{E}_0 \times \mathbf{E}_0^*]$ . При таком выборе

осей  $\mathbf{E}_0 = A_0(\mathbf{e}_x + i\mathbf{e}_y)$ ,  $\mathbf{N}_0 = A_0^2\mathbf{e}_z$ , где  $A_0 = |\mathbf{E}_0|/\sqrt{2}$ . Произведение  $\mu \equiv (\mathbf{E} \cdot \mathbf{E})$ , определяющее выпрямляющую фазу  $\epsilon$ , в достаточно малой окрестности начала координат может быть аппроксимировано линейной зависимостью

$$\mu(\mathbf{r}) = |\mathbf{E} \cdot \mathbf{E}|e^{2i\epsilon} \approx (\mathbf{g} \cdot \mathbf{r}), \quad (1)$$

где  $\mathbf{g} = \nabla(\mathbf{E} \cdot \mathbf{E})|_{\mathbf{r}=0}$ , а векторный дифференциальный оператор  $\nabla = \{\partial_x, \partial_y, \partial_z\}$ .

В свою очередь, комплексная комбинация  $\mathbf{A} + i\mathbf{B}$  вблизи  $C$ -точки может быть также аппроксимирована, как

$$\mathbf{A} + i\mathbf{B} = \mathbf{E}e^{-i\epsilon} \approx \{\mathbf{E}_0 + (\mathbf{r}\nabla)\mathbf{E}\}|_{\mathbf{r}=0} \sqrt{\frac{\mu^*(\mathbf{r})}{|\mu(\mathbf{r})|}}. \quad (2)$$

Отметим, что значение комплексного корня в (2) не зависит от модуля  $\mathbf{r}$ , а только от его направления. Легко показать, что комплексный аргумент подкоренного выражения принимает все возможные значения от 0 до  $2\pi$ . При достаточно малом  $|\mathbf{r}|$  можно пренебречь вторым слагаемым в фигурных скобках при оценке векторных проекций  $\mathbf{A}_\perp$  и  $\mathbf{B}_\perp$  векторов  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$  на плоскость  $Oxy$ . Заметим, что это нельзя делать при оценке  $z$ -проекции этих векторов, так как первое слагаемое  $\mathbf{E}_0$  в фигурных скобках в (2) не имеет проекции на ось  $z$ .

В итоге, описывать распределение полуосей эллипса вблизи  $C$ -точки можно с помощью двух выражений:

$$\mathbf{A}_\perp + i\mathbf{B}_\perp \approx \mathbf{E}_0e^{-i\epsilon}, \quad (3)$$

$$A_z + iB_z \approx (\mathbf{r} \cdot \nabla E_z|_{\mathbf{r}=0})e^{-i\epsilon} \equiv -(\boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{r})e^{-i\epsilon}. \quad (4)$$

Вектор  $\boldsymbol{\gamma}$  в формуле (4) также непосредственно связан с распределением вектора нормали  $\mathbf{N}$  вблизи  $C$ -точки. Так как скалярное произведение  $(\mathbf{E} \cdot \mathbf{N})$  всюду равно нулю, справедлива следующая цепочка равенств:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\gamma} &= -\nabla E_z = -A_0^{-2}\nabla(\mathbf{E} \cdot \mathbf{N}_0) = \\ &= A_0^{-2}\nabla(\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{N}) = A_0^{-1}\nabla(N_x + iN_y), \end{aligned} \quad (5)$$

где все производные берутся в точке  $\mathbf{r} = 0$ . Для дальнейшего описания  $C$ -точки нам будет удобно рассмотреть следующие комбинации декартовых компонент векторов  $\mathbf{g}$  и  $\boldsymbol{\gamma}$ :

$$\begin{aligned} g_+ &= g_x - ig_y = g_\perp \sqrt{1 + \Upsilon} e^{i\varphi_0}, \\ g_- &= g_x + ig_y = g_\perp \sqrt{1 - \Upsilon} e^{(3i\varphi_0 - i\beta)}, \\ g_z &= \kappa g_\perp e^{(2i\varphi_0 + i\varphi_z)}, \\ \gamma_+ &= \gamma_x - i\gamma_y = \gamma_\perp \sqrt{1 + \Upsilon} e^{i\beta_z}, \\ \gamma_- &= \gamma_x + i\gamma_y = \gamma_\perp \sqrt{1 - \Upsilon} e^{i(2\varphi_0 - \nu)}. \end{aligned} \quad (6)$$

В (6) введены следующие обозначения:  $g_\perp = \sqrt{|g_x|^2 + |g_y|^2}$ ,  $\Upsilon = (|g_+|^2 - |g_-|^2)/(|g_+|^2 + |g_-|^2)$ ,  $\varphi_0 = \arg g_+$ ,  $\beta = \arg(g_+^3 g_-^*)$ ,  $\gamma_\perp = \sqrt{|\gamma_x|^2 + |\gamma_y|^2}$ ,  $\Upsilon_z = (|\gamma_+|^2 - |\gamma_-|^2)/(|\gamma_+|^2 + |\gamma_-|^2)$ ,  $\beta_z = \arg \gamma_+$  и  $\nu = \arg(g_+^2 \gamma_-^*)$ . Отметим, что параметр  $\varphi_0$  отвечает за поворот всего распределения электрического поля вблизи  $C$ -точки вокруг оси  $Oz$ . В дальнейшем без ограничения общности будем считать  $\varphi_0 = 0$ .

Точки сингулярности круговой поляризации принято делить на различные классы, анализируя изменение ориентации векторов  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$  при обходе  $C$ -точки по малому замкнутому контуру, как правило, лежащему в плоскости  $Oxy$ . Для простоты в качестве такого контура выбирают окружность с радиусом  $r_0$  и центром в начале координат:  $\mathbf{r} = r_0(\mathbf{e}_x \cos \varphi + \mathbf{e}_y \sin \varphi)$  и рассматривают две комбинации проекций векторов  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$ :

$$A_x + iA_y = -i(B_x + iB_y) = A_0 e^{i\epsilon(\varphi)}, \quad (7)$$

$$A_r + iB_r = A_0 e^{i\varphi - i\epsilon(\varphi)}, \quad (8)$$

где нижние индексы обозначают проекции векторов на оси  $Ox$  и  $Oy$  или на сам вектор  $\mathbf{r}$ , задающий точку на рассматриваемом круговом контуре. Аргументы комплексных выражений  $A_x + iA_y$  и  $B_x + iB_y$ , полученные из формулы (7), с одной стороны равны  $\epsilon$  и  $\epsilon + \pi/2$ , а с другой стороны являются углами  $\psi_A$  и  $\psi_B$  между соответствующими полуосями эллипса и осью  $Ox$ . Эти углы, как и  $\epsilon$ , определены с точностью до  $\pi$ . Производная функции  $\epsilon(\varphi)$

$$\epsilon'(\varphi) = \frac{\Upsilon}{2 + 2\sqrt{1 - \Upsilon^2} \operatorname{Re}(e^{2i\varphi} e^{i\beta})}, \quad (9)$$

причем знаменатель дроби неотрицателен. Следовательно, при  $\Upsilon > 0$  функция  $\epsilon(\varphi)$  монотонно возрастает, а при  $\Upsilon < 0$  функция  $\epsilon(\varphi)$  монотонно убывает. Соответственно проекции полуосей  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$  на плоскость  $xy$  совершают пол-оборота против ( $\Upsilon > 0$ ) или по ( $\Upsilon < 0$ ) часовой стрелке при однократном обходе начала координат (т.е. изменении  $\varphi$  от 0 до  $2\pi$ ). Поэтому  $C$ -точки разделяются на два класса с положительным ( $\Upsilon > 0$ ) и отрицательным ( $\Upsilon < 0$ ) топологическим индексом [21]. Вторая характеристика  $C$ -точек ( $L$ -характеристика) равна количеству корней уравнений  $A_r(\varphi) = 0$  или  $B_r(\varphi) = 0$ . Используя (8), несложно показать, что корни  $\varphi_{A_n}$  и  $\varphi_{B_n}$  уравнений  $A_r(\varphi) = 0$  и  $B_r(\varphi) = 0$  попарно отличаются на  $\pi$  и их совокупность совпадает с множеством корней уравнения  $\operatorname{Im}[(A_r + iB_r)^2] = 0$ . При помощи замены  $u = e^{2i\varphi}$  это уравнение может быть сведено к виду

$$g_-^* u^3 + g_+^* u^2 - g_+ u - g_- = 0. \quad (10)$$

Физический смысл имеют только унимодулярные корни такого многочлена (они удовлетворяют условию  $|u_n| = 1$ ). Их количество равно 1 или 3, если дискриминант

$$D_L = (|g_+|^2 - 3|g_-|^2)^2 - \frac{4}{3}|g_+|^4 - \frac{8}{3}\text{Re}(g_-^* g_+^3) = \frac{4}{3}g_\perp^4 \left( 11\Upsilon^2 - 14\Upsilon + 2 - 2(1 + \Upsilon)\sqrt{1 - \Upsilon^2} \cos \beta \right) \quad (11)$$

отрицателен или положителен, соответственно.

Две вышеупомянутые характеристики не рассматривают зависимости  $z$ -проекции векторов  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$  от пространственных координат, а потому не могут полностью описать поле вблизи  $C$ -точки. Дополнить описание можно, рассмотрев в ее окрестности также поведение вектора  $\mathbf{N}$ , перпендикулярного к плоскостям эллипсов поляризации. В самой  $C$ -точке  $\mathbf{N}$  параллелен оси  $Oz$ , но в близлежащих к ней точках он также имеет малые ненулевые проекции на плоскость  $Oxy$ . Вид картины проекций вектора  $\mathbf{N}_\perp$  на эту плоскость  $Oxy$  определяется вектором  $\boldsymbol{\gamma}$ . В начале координат эти картины имеют особую точку одного из трех возможных типов: “вихрь”, “седло” или “узел”. В соответствии с формулой (5)

$$N_x + iN_y \approx A_0(\boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{r}) = 0.5r_0 A_0(\gamma_+ e^{i\varphi} + \gamma_- e^{-i\varphi}), \quad (12)$$

$$N_\varphi = N_y \cos \varphi - N_x \sin \varphi \approx 0.5r_0 A_0 \text{Im}(\gamma_+ + \gamma_- e^{-2i\varphi}). \quad (13)$$

Здесь  $N_\varphi$  – проекция вектора  $\mathbf{N}$  на направление, задаваемое вектором  $[\mathbf{e}_z \times \mathbf{e}_r]$ , где  $\mathbf{e}_r = \mathbf{e}_x \cos \varphi + \mathbf{e}_y \sin \varphi$ . По аналогии с формулой (7), комплексный аргумент  $\arg(N_x + iN_y)$  равен углу между векторной проекцией  $\mathbf{n}_\perp$  и осью  $Ox$ . Этот угол увеличивается при обходе точки сингулярности, если  $|\gamma_+| > |\gamma_-|$  (т.е.  $\Upsilon_z > 0$ ) и уменьшается, когда  $|\gamma_+| < |\gamma_-|$ . Это позволяет разделить картины распределений  $\mathbf{N}_\perp$  на два класса с положительным и отрицательным топологическим индексом. Тип особой точки, лежащей в начале координат, определяется из зависимости  $N_\varphi(\varphi) = 0$ . При  $\Upsilon_z < 0$  корней такого уравнения всегда 4, и картина проекций  $\mathbf{n}_\perp$  имеет особенность типа “седло”. При  $\Upsilon_z > 0$  уравнение  $N_\varphi(\varphi) = 0$  может не иметь корней при  $|\gamma_-| < |\text{Im}\gamma_+|$  (или  $|\sin \beta_z| > \sqrt{(1 - \Upsilon_z)/(1 + \Upsilon_z)}$ ) или также иметь четыре корня, если последнее неравенство не выполняется, что соответствует типам “вихрь” и “узел”. Отметим, что картины проекций полуосей эллипса, задаваемых векторами  $\mathbf{A}$  (или  $\mathbf{B}$ ), и векторов нормали  $\mathbf{N}$  определяются наборами различных параметров и, следовательно, не связаны друг с другом.

Рассматривая поведение определенных проекций директоров  $\overleftrightarrow{\mathbf{A}}$ ,  $\overleftrightarrow{\mathbf{B}}$  и вектора  $\mathbf{N}$ , задающих эллипс поляризации, мы неизбежно теряем часть информации о полном распределении непараксиального электромагнитного поля. Описанные выше оптические ленты позволяют восполнить эти потери. Дадим более строгое определение этому понятию. Будем называть оптической лентой, образуемой вектором  $\mathbf{V}$ , совокупность значений  $\mathbf{V}$ , вычисленных и отложенных от всех точек замкнутой гладкой кривой (кривой построения ленты). В роли вектора  $\mathbf{V}$  может выступать любой из векторов полуосей  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$  или вектор  $\mathbf{N}$ , а кривая построения не обязана лежать в одной плоскости, но не должна иметь самопересечений. Кривую построения удобно задать параметрически при помощи вектор-функции  $\mathbf{r}(s)$ , где  $s$  изменяется от 0 до  $l$  ( $\mathbf{g}(0) = \mathbf{g}(l)$ ), а  $l$  – длина кривой. Основной топологической характеристикой ленты  $\mathbf{V}(\mathbf{r}(s))$ , построенной на плоском контуре, является число перекручиваний  $\tau$ , определенное в работе [16]. Все ленты, рассматривавшиеся в этой работе, строились исключительно на контурах в виде окружностей. Для вычисления  $\tau$  в каждой точке такой окружности, параметрически задаваемой уравнением  $\mathbf{r}(s)$ , строится локально ортогональная ей плоскость  $\Pi_s$ . Индекс  $\tau$  определяется как число полных оборотов векторной проекции  $\mathbf{V}$  на плоскость  $\Pi_s$ , сосчитанное при однократном обходе контура построения. Для лент векторов  $\mathbf{N}$  он может принимать только целые значения, в то время как для лент директоров  $\overleftrightarrow{\mathbf{A}}$  и  $\overleftrightarrow{\mathbf{B}}$  значения могут быть и полуцелыми, из-за тождественности  $\overleftrightarrow{\mathbf{A}}$  и  $-\overleftrightarrow{\mathbf{A}}$ .

**3. Ленты эллипсов поляризации, построенных на круговых контурах малых размеров, окружающих уединенную линию сингулярности поляризации электромагнитного поля.** В качестве контура построения ленты поляризации будем использовать окружность малого радиуса  $r_0$  с центром в начале координат (т.е. в точке сингулярности круговой поляризации), нормаль к плоскости которой выбирается произвольно и задается единичным вектором  $\mathbf{e}_\zeta$  (рис. 1). Вводя два ортогональных ему вектора  $\mathbf{e}_\xi$  и  $\mathbf{e}_\eta = [\mathbf{e}_\zeta \times \mathbf{e}_\xi]$ , зададим контур построения ленты формулой  $\mathbf{r}(s) = r_0(\mathbf{e}_\xi \cos(s/r_0) + \mathbf{e}_\eta \sin(s/r_0))$ , где  $s \in [0; 2\pi r_0)$ . Направление обхода контура связано с направлением нормали к нему правилом правого винта.

Векторная проекция  $\mathbf{A}$  на плоскость, перпендикулярную контуру построения ленты, имеет составляющие, направленные вдоль параллельного  $\mathbf{r}(s)$  единичного вектора и орта  $\mathbf{e}_\zeta$ . Приближенное выражение для величин  $A_r$  и  $A_\zeta$  этих составляющих можно

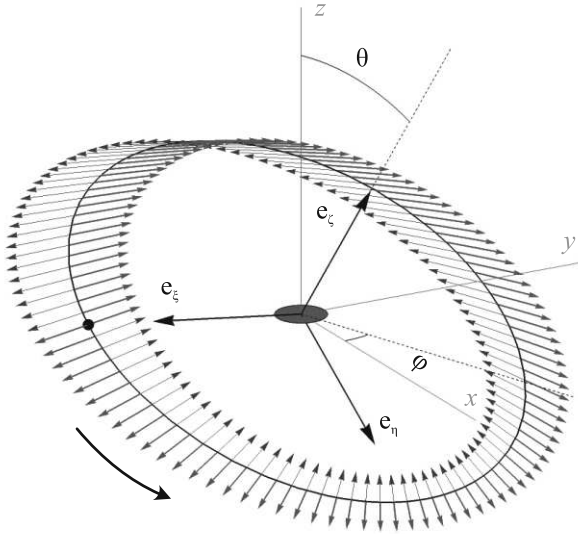


Рис. 1. (Цветной онлайн) Пример ленты, образованной большой осью эллипса поляризации с числом пере­кручивания 1/2. Каждая половина большой оси (тол­стая красная и тонкая синяя стрелки) совершает пол­оборота вокруг контура за один полный проход вдоль направления, указанного изогнутой стрелкой. Началь­ная (конечная) точка контура построения показана закрашенным черным кружком. Эллипс поляризации (круг) в начале координат показан красным цветом

получить из формулы (3) для проекции  $A_{\perp}$  на плос­кость  $Oxy$ , игнорируя малую проекцию  $Oz$ :

$$A_r(\psi) = \text{Re} \left\{ (E_{0\xi}^* \cos \psi + E_{0\eta}^* \sin \psi) e^{i\epsilon(\psi)} \right\}, \quad (14)$$

$$A_{\zeta}(\psi) = |E_{0\zeta}| \cos(\epsilon(\psi) - \arg(E_{0\zeta})). \quad (15)$$

При изменении  $\psi$  от 0 до  $2\pi$  обе проекции меняют знак на противоположный, что соответствует поворо­ту эллипса поляризации на половину оборота, т.е. модуль числа пере­кручивания края ленты равен 1/2, а сама лента является неориентируемой лентой Ме­биуса. Начальная (конечная) точка замкнутого кон­тура обхода и его направление могут быть выбраны таким образом, чтобы проекция  $A_{\zeta}(\psi)$  была в ней нулевой, а в прочих точках контура положительной. Если при этом знак проекции  $A_r(0)$  положительный (отрицательный), а знак  $A_r(2\pi)$ , соответственно, отрицательный (положительный), то эллипс поляри­зации совершает половину оборота против часовой стрелки (по часовой стрелке) при обходе контура. Поэтому число пере­кручиваний ленты, образуемой большими осями эллипсов поляризации, может быть вычислено по формуле:

$$\begin{aligned} \tau_A &= \frac{1}{2} \text{sgn} A_r(0) = \frac{1}{2} \text{sgn} \text{Re} \left( -i E_{0\xi}^* \exp(i \arg E_{0\zeta}) \right) = \\ &= \frac{1}{2} \text{sgn} \text{Im} \left( E_{0\xi}^* E_{0\zeta} \right) = -\frac{1}{2} \text{sgn} \left( [\mathbf{e}_{\zeta} \times \mathbf{e}_{\xi}] \cdot \mathbf{N}_0 \right) = \\ &= -\frac{1}{2} \text{sgn} \text{Im} \left\{ (\mathbf{g}^* \cdot \mathbf{N}_0) - g_{\zeta}^* N_{0\zeta} E_{0\zeta}^2 \right\}. \quad (16) \end{aligned}$$

Для вычисления числа пере­кручивания  $\tau_B$  ис­пользуются аналогичные рассуждения, приводящие к выражению, совпадающему по виду с предпослед­ним выражением в (16). Однако, для выполнения условия  $B_{\zeta} > 0$  на всем контуре интегрирования, кроме начальной (конечной) точки замкнутого кон­тура, саму начальную точку надо выбирать диамет­рально противоположной той, которая использовалась для расчета  $\tau_A$ . В итоге число  $\tau_B$  оказывается *противоположным* числу  $\tau_A$ . Отметим, что числа  $\tau_A$  и  $\tau_B$  зависят не только от характеристик поля в  $S$ -точке, но и от ориентации плоскости самого контура построения.

Важно подчеркнуть, что формула (16) неприме­нима для тех случаев, когда аргумент функции  $\text{sgn}$  в точности равен нулю. В первую очередь это соот­ветствует ситуации, когда контур построения ленты лежит в плоскости  $Oxy$ . При полном пренебрежении величинами проекций  $A_z$  и  $B_z$  лента, построенная вдоль вышеупомянутого контура, окажется целиком лежащей в плоскости  $Oxy$  и, как следствие, незакру­ченной. В качестве базиса контура обхода выберем  $\mathbf{e}_{\xi} = \mathbf{e}_x$  и  $\mathbf{e}_{\eta} = \mathbf{e}_y$ , тогда параметр  $\psi$  будет тожде­ственен полярному углу  $\varphi$  в плоскости  $Oxy$ .

Формулы (3)–(4) позволяют утверждать, что в малой окрестности точки сингулярности круговой поляризации проекция  $A_z$  пропорциональна модулю радиус-вектора  $r$ , в отличие от длины векторной про­екции  $A_r = A_x \cos \varphi + A_y \sin \varphi$ . Поэтому для большей части контура построения ленты оси эллипса поля­ризации слабо отклонены от плоскости  $Oxy$ . Исключе­ния из этого правила составляют малые участки контура построения, лежащие вблизи точек, в кото­рых  $A_r$  обращается в нуль. Рассмотрим точку  $\varphi_1$ , такую, что  $A_r(\varphi_1) = 0$ . Если в ней знак производной  $A'_r(\varphi_1)$  положителен, то  $A_r$  меняет знак с отрица­тельного на положительный, когда монотонно меня­ющийся параметр  $\varphi$  проходит значение  $\varphi = \varphi_1$ . Если при этом значение  $A_z(\varphi_1)$  также положительно, то векторная проекция  $\mathbf{A}$  на плоскость  $Orz$  совершает при прохождении точки  $\varphi = \varphi_1$  пол­ оборота по ча­совой стрелке и наоборот.

Аналогичное правило работает и для случая  $A'_r(\varphi) < 0$ : проекция совершит пол-оборота против часовой стрелки при  $A_z(\varphi_1) > 0$  и наоборот. В итоге число пере­кручиваний ленты, образуемой большими



осями эллипсов поляризации вдоль выбранного контура построения можно вычислить с помощью правила:

$$\tau_A = -\frac{1}{2} \sum_{\varphi_n} \operatorname{sgn} (A'_r(\varphi_n) A_z(\varphi_n)). \quad (17)$$

Здесь суммирование проводится по всем  $\varphi_n \in [0; 2\pi)$ , таким что  $A_r(\varphi_n) = 0$ . При помощи формул (1), (14), (15) выражение (17) можно записать в более конкретном виде

$$\tau_A = \frac{1}{2} \sum_{u_n} \operatorname{sgn} \left\{ \left[ 1 - 0.5\Upsilon + \sqrt{1 - \Upsilon^2} \operatorname{Re} (u_n e^{i\beta}) \right] \times \left[ \sqrt{1 + \Upsilon_z \sin \beta_z} - \sqrt{1 - \Upsilon_z} \operatorname{Im} (u_n e^{i\nu}) \right] \right\}, \quad (18)$$

где  $u_n$  – унимолярные корни уравнений (10), определяющее  $L$ -характеристику  $C$ -точки в центре контура построения ленты. Таким образом, если  $C$ -точка имеет тип “лимон”, модуль числа  $\tau_A$  может быть равен только  $1/2$ , в то время как для  $C$ -точек типа “монстар” и “звезда”  $|\tau_A|$  может иметь значения как  $1/2$ , так и  $3/2$ .

Формула для числа перекручиваний ленты  $\tau_B$ , образованной малыми осями эллипса поляризации, полностью аналогична (17) и, несмотря на различия в выражениях для векторов полуосей  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$ , приводит к идентичному результату, т.е. для данного класса лент  $\tau_A = \tau_B$ . Анализ выражения (18) показывает, что, за исключением случая одновременного выполнения условия  $\Upsilon \in (0; 0.8)$  и  $D_L > 0$  (тип “монстар”), первая скобка в (18) может быть опущена без изменения итогового значения  $\tau_A$ . Кроме того, если картина проекций векторов нормали  $\mathbf{N}$  к плоскостям эллипсов поляризации на плоскость  $Oxy$  (см. формулу (13)) имеет тип “вихрь”, выражения во вторых квадратных скобках в (18) всегда совпадают со знаком  $\sin \beta_z$ . Последнее также упрощает формулу для числа  $\tau_A$ :

$$\tau_A = \left( 1 - \frac{1}{2} \operatorname{sgn} \Upsilon \right) \operatorname{sgn} \sin \beta_z. \quad (19)$$

**4. Свойства оптических лент, построенных на не лежащих в одной плоскости контурах.** Для определения числа перекручиваний  $\tau$  оптической ленты, образуемой вектором  $\mathbf{V}$ , необходимо построить ортогональные базисные векторы в плоскостях  $\Pi_s$ , перпендикулярных к касательной к контуру построения ленты, в каждой его точке [16]. В случае плоских контуров построение такого базиса не вызывает затруднений: один его вектор выбирается перпендикулярным к плоскости контура и является всюду постоянным, а другой лежит в плоскости контура и в каждой точке ему перпендикулярен. Однако в случае неплоского контура алгоритм построения

такого базиса гораздо более сложен и неоднозначен, поэтому в качестве альтернативы числу перекручиваний рассматривают его обобщение, известное как коэффициент перекручивания [37]:

$$\mathcal{T}_W = \frac{1}{2\pi} \int_0^l \left( \left[ \frac{\partial \mathbf{V}_p}{\partial s} \times \mathbf{V}_p \right] \cdot \dot{\mathbf{r}} \right) ds, \quad (20)$$

где

$$\mathbf{V}_p = \frac{\mathbf{V} |\dot{\mathbf{r}}|^2 - \dot{\mathbf{r}} (\mathbf{V} \cdot \dot{\mathbf{r}})}{|\mathbf{V} |\dot{\mathbf{r}}|^2 - \dot{\mathbf{r}} (\mathbf{V} \cdot \dot{\mathbf{r}})|}. \quad (21)$$

Для плоских контуров  $\mathcal{T}_W = \tau$ , однако для контуров, не лежащих в одной плоскости, интеграл (20) не всегда принимает целые или полуцелые значения, и, следовательно, теряет роль топологического индекса. Число перекручиваний  $\tau$  формально совпадает с интегралом  $\mathcal{T}_W$ , если для его вычисления в случае неплоских контуров строить в плоскостях  $\Pi_s$  так называемый базис Френе. Однако, такое требование может приводить к мнимому “перекручиванию”, независимому от вращения самого вектора  $\mathbf{V}_p$ , поскольку поперечные векторы базиса Френе при полном обходе вокруг не лежащей в одной плоскости кривой  $\mathbf{r}(s)$  совершают вокруг нее

$$\mathcal{T} = \frac{1}{2\pi} \int_0^l \frac{[\dot{\mathbf{r}}(s) \times \ddot{\mathbf{r}}(s)] \cdot \ddot{\mathbf{r}}(s)}{|\dot{\mathbf{r}} \times \ddot{\mathbf{r}}|^2} ds \quad (22)$$

оборотов [38]. В (22) двумя и тремя точками обозначаются вторая и третья производные параметрически заданной векторной функции  $\mathbf{r}(s)$  по  $s$ . Интеграл  $\mathcal{T}$  также не обязательно является целым числом и называется коэффициентом полного геометрического кручения. Отметим, что этот коэффициент характеризует только контур построения, но не построенную на нем оптическую ленту.

Для неплоских контуров в качестве величины, аналогичной числу перекручивания  $\tau$ , следует выбрать целочисленный индекс внутреннего перекручивания  $\mathcal{N}$ , дискретность которого сохраняет за ним роль топологического индекса. Величина  $\mathcal{N}$  определяется как разность между двумя необязательно целыми числами  $\mathcal{T}_W$  и  $\mathcal{T}$ . Существует также возможность найти индекс  $\mathcal{N}$  как число перекручиваний  $\tau$ , если вместо базиса Френе в плоскостях  $\Pi_s$  использовать минимизирующее вращение базис Бишопа [39]. В случае плоских контуров базисы Френе и Бишоп тождественны, коэффициент полного геометрического кручения контура  $\mathcal{T} = 0$ , и все три числа  $\tau$ ,  $\mathcal{T}_W$  и  $\mathcal{N}$  совпадают.

Однако  $\mathcal{N}$  – не единственный дискретный индекс, обобщающий понятие числа перекручиваний. Если

образованная вектором  $\mathbf{V}$  оптическая лента имеет два края, задаваемых кривыми  $\mathbf{r}(s)$  и  $\mathbf{h}(s) = \mathbf{r}(s) + \varepsilon \mathbf{V}(\mathbf{r}(s))$ , то ее перекрученность также может быть охарактеризована при помощи интегральной формы Гаусса индексом зацепления ее краев [37]

$$\mathcal{L} = \frac{1}{4\pi} \int_0^{l_1} \int_0^{l_2} \frac{\mathbf{r}(s_1) - \mathbf{h}(s_2)}{|\mathbf{r}(s_1) - \mathbf{h}(s_2)|} \cdot [\dot{\mathbf{r}}(s_1) \times \dot{\mathbf{h}}(s_2)] ds_1 ds_2. \quad (23)$$

Здесь  $\varepsilon$  – коэффициент, обеспечивающий согласование размерностей векторов  $\mathbf{r}(s)$  и  $\mathbf{V}$  и отсутствие взаимных пересечений линий, определяемых векторами  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{h}$  и имеющих длины  $l_1$  и  $l_2$  соответственно. При этом  $\mathbf{r}(0) = \mathbf{r}(l_1)$ , а  $\mathbf{h}(0) = \mathbf{h}(l_2)$ . Для лент, имеющих только один край (оптические ленты Мебиуса), определение (23) неприменимо, но в этом случае индекс зацепления можно формально вычислить, представив край такой ленты как две независимые (не замкнутые) кривые, соответствующие выбору разного знака, образующего ленту вектора  $\mathbf{V}$ . В этом случае индекс зацепления краев ленты будет полуцелым числом.

Индекс внутреннего перекручивания  $\mathcal{N}$  в общем случае не совпадает с индексом зацепления краев  $\mathcal{L}$ , и их разность определяется теоремой Кэлугэрян [40], согласно которой:

$$\mathcal{L} - \mathcal{N} = \mathcal{T} + \mathcal{W}. \quad (24)$$

Здесь  $\mathcal{W}$  – еще одна характеристика контура построения ленты, называемая коэффициентом скрюченности [37]:

$$\mathcal{W} = \frac{1}{4\pi} \int_0^l \int_0^l \frac{\mathbf{r}(s_1) - \mathbf{r}(s_2)}{|\mathbf{r}(s_1) - \mathbf{r}(s_2)|^3} \cdot [\dot{\mathbf{r}}(s_1) \times \dot{\mathbf{r}}(s_2)] ds_1 ds_2. \quad (25)$$

Характеристика  $\mathcal{W}$  выражает число петель на плоской проекции кривой контура, усредненное по всем возможным направлениям проецирования, и необязательно является целым числом.

Важными характеристиками контура построения оптической ленты  $\mathbf{r}(s_1)$  являются его индексы зацепления  $\mathcal{L}_{C,L}$  с находящимися вблизи него линиями сингулярности круговой поляризации  $\mathbf{h}_C(s_2)$  и линейной поляризации  $\mathbf{h}_L(s_2)$ . Для нахождения  $\mathcal{L}_C$  необходимо положить в формуле (23)  $\mathbf{h}(s_2) = \mathbf{h}_C(s_2)$ , а для определения  $\mathcal{L}_L$  следует считать в ней  $\mathbf{h}(s_2) = \mathbf{h}_L(s_2)$ . Числа  $\mathcal{L}_{C,L}$  равны количеству охватов контуром построения линий сингулярности круговой и линейной поляризации. Знаки индексов  $\mathcal{L}_{C,L}$  не имеют особой важности, поскольку невозможно за-

дать физически связанные направления обхода контуров, определяемых векторами  $\mathbf{r}(s_1)$  и  $\mathbf{h}_{C,L}(s_2)$ .

**5. Топология лент эллипсов поляризации света, рассеянного диэлектрической сферой и металлическим сфероидом субволновых размеров.** В [26] взаимодействие эллиптически поляризованной плоской электромагнитной волны (длина волны  $\lambda = 710$  нм) с диэлектрической сферой радиусом  $R_0 = 90$  нм исследовалось с помощью пакета COMSOL Multiphysics методом конечных элементов (Finite Element Method). Для фиксированного набора параметров падающего излучения и диэлектрической среды задавалась граница расчетной области, на которой использовались периодические граничные условия. Расчетная область полностью окружалась модельной средой, способной поглощать все падающее на нее излучение (Perfectly Matched Layers). Это позволило избежать возможного “отражения” волны от ее границ. Используемая расчетная сетка состояла более чем из 50000 конечных элементов. При построении лент авторы ограничивались контурами, имеющими форму окружностей достаточно малого радиуса  $R$ , который был на порядок (или более) меньше, чем  $R_0 \ll \lambda$ .

Было установлено, что непараксиальное электрическое поле излучения, рассеянного диэлектрической сферой, содержит ленты поляризации с различными топологическими характеристиками. Ленты векторов  $\mathbf{N}$ ,  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$ , построенные вдоль плоских контуров, которые не охватывают линии сингулярности поляризации, почти всегда являются тривиальными ( $\mathcal{L} = 0$ ). Пример такой ленты показан на рис. 2. Исключением является ситуация, когда нормаль к контуру обхода перпендикулярна к “усредненному” направлению одного из векторов  $\mathbf{N}$ ,  $\mathbf{A}$  или  $\mathbf{B}$ . В этом случае на контуре существует, по крайней мере, две точки, в которых упомянутый вектор будет практически коллинеарен касательной к контуру. В результате топология соответствующей ленты определяется поведением малых компонент этого вектора, которые описывают его отклонение от “среднего” направления и коэффициент зацепления рассматриваемой ленты может быть отличен от нуля. Авторы обнаружили в ближнем поле диэлектрической сферы ленты с коэффициентом зацепления  $\mathcal{L} = \pm 1$ , т.е. перекрученные на один полный оборот по или против часовой стрелки (см. рис. 2).

Результаты работы [26] сформулированы на основе построения и описания свойств около трех тысяч оптических лент, заметаемых векторами  $\mathbf{N}$ ,  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$  при их движении по различно ориентируемым в пространстве окружностям радиусом  $R \approx 10$  нм в ма-

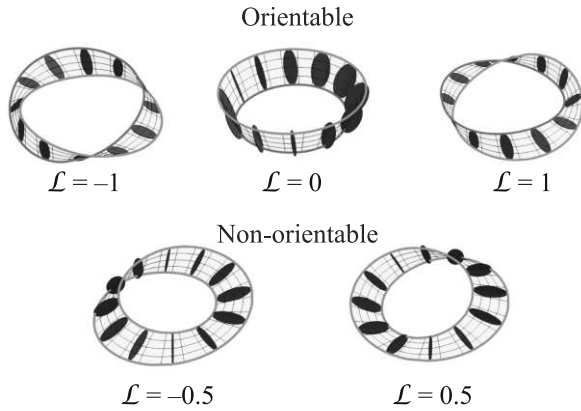


Рис. 2. (Цветной онлайн) Примеры лент, описываемых двунаправленным вектором  $\vec{A}$  большой оси эллипса поляризации с разными коэффициентами зацепления их краев. Эллипсы поляризации окрашены в красный цвет, если вектор электрического поля кажется наблюдателю вращающимся по часовой стрелке, и синий – в противоположном случае. Края лент показаны разными цветами, если их два (т.е. лента ориентируемая)

лой окрестности 27 случайным образом выбранных точек, находящихся как внутри, так и вне наночастицы на расстоянии порядка нескольких  $R$  от ближайшей линии сингулярности поляризации. Направление нормали к плоскости этих контуров менялось с шагом  $5^\circ$ . В результате только у 184 из 2916 лент, контуры которых были практически компланарны с отслеживаемым вектором, коэффициент зацепления был отличен от нуля, при этом положительные и отрицательные значения коэффициента  $\mathcal{L}$  встречались приблизительно в равной пропорции.

Численное моделирование, проведенное в широком диапазоне значений степени эллиптичности  $M$  падающей плоской электромагнитной волны, подтвердило, что ленты директоров осей эллипса поляризации  $\vec{A}$  и  $\vec{B}$  рассеянного излучения, построенные при их перемещении вдоль малых локально ортогональных  $C$ -линиям контуров, охватывающих их в различных точках этих линий, являются нетривиальными (характеризуются коэффициентом зацепления ее краев  $\mathcal{L} = \pm 1/2$ ). Это возможно благодаря неоднозначности выбора направлений  $\vec{A}$  и  $\vec{B}$  в точках, принадлежащих линиям. Ленты с полуцелым коэффициентом зацепления краев неориентируемы и представляют собой оптические ленты Мебиуса с полуоборотом в положительном ( $\mathcal{L} = 1/2$ ), или отрицательном ( $\mathcal{L} = -1/2$ ) направлениях по мере обхода охватывающего  $C$ -линию контура в положительном направлении (рис. 2). Исключением являются ленты, построенные вокруг точек, около которых происхо-

дит максимальное сближение двух  $C$ -линий, и контур, используемый для построения ленты, охватывает сразу обе линии сингулярности поляризации. В этом случае  $\mathcal{L} = \pm 1$  (рис. 2). Знаки коэффициентов зацепления лент  $\vec{A}$  и  $\vec{B}$  совпадали для определенных участков  $C$ -линий и были противоположны на других ее участках.

На рисунке 3 показано типичное распределение значений коэффициентов зацепления  $\mathcal{L}$  краев лент

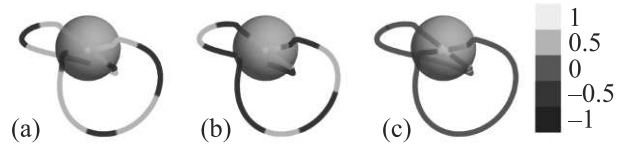


Рис. 3. (Цветной онлайн) Величина коэффициентов зацепления краев лент векторов  $\vec{A}$  (a),  $\vec{B}$  (b) и  $\vec{N}$  (c), охватывающих  $C$ -линию, при падении на сферу волны со степенью эллиптичности эллипса поляризации  $M = 0.75$

векторов  $\vec{A}$ ,  $\vec{B}$  и  $\vec{N}$ , построенных вокруг различных точек существующей около диэлектрической сферы  $C$ -линии, в случае, когда она один раз пересекает плоскость окружности, вдоль которой строилась лента. Большинство лент, замечаемых вектором  $\vec{N}$ , ожидаемо являются тривиальными. Исключение составляют те контуры построения, плоскость которых практически совпадают с “усредненным” направлением вектора  $\vec{N}$  в небольшой области вблизи центра контура. В результате численного моделирования не обнаружено связи между топологическим типом лент, замечаемых векторами  $\vec{A}$ ,  $\vec{B}$  и  $\vec{N}$  и охватывающих линию сингулярности поляризации, и знаком входящего в формулу (6) параметра изотропии  $\Upsilon$   $C$ -точки этой линии [22], в которой они пересекают плоскость контура построения. Знак  $\Upsilon$  совпадает со знаком топологического индекса паттерна, образуемого проекциями эллипсов поляризации вблизи  $C$ -точки на плоскость, совпадающую с плоскостью вращения  $\vec{E}$  в точке сингулярности круговой поляризации. Данный результат согласуется с ранней работой [27] и, несомненно, указывает на то, что для определения топологического типа ленты учет даже малой непланарности распределения осей эллипсов поляризации вблизи  $C$ -точки является необходимым.

Оптические ленты, построенные на неплоских контурах (см. рис. 4), имеют значительно более сложную форму. Примеры таких лент, приведены в работе [28], в которой они строились на основе аналитических формул [41] для компонент вектора напряжен-



Рис. 4. (Цветной онлайн) Примеры не лежащих в одной плоскости контуров построения лент

ности электрического поля электромагнитного излучения, рассеянного золотой частицей, имеющей форму вытянутого эллипсоида с межфокусным расстоянием 30 нм, в случае падения на нее плоской эллиптически поляризованной монохроматической волны ( $\lambda = 600$  нм). В [22] подробно описана возникающая в ближнем поле рассеянного излучения структура линий сингулярности поляризации и ее зависимость от угла между волновым вектором падающей на частицу волны и главной осью эллипсоида, от степени эллиптичности падающего излучения и от угла, задающего в плоскости перпендикулярной волновому вектору ориентацию главной оси его эллипса поляризации.

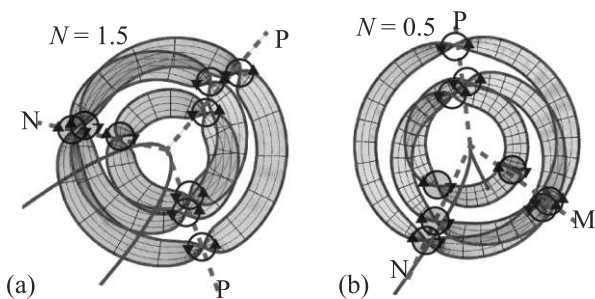


Рис. 5. (Цветной онлайн) Неориентируемые ленты, заметаемые векторной проекцией директора большой оси эллипса поляризации на ортогональную направлению обхода ленты плоскость, построенные вдоль контура 5 рис. 3, имеющего индекс зацепления с  $C$ -линией  $\mathcal{L}_C = 3$ , при значениях индексов внутреннего перекручивания равных 1.5 (а) и 0.5 (б). Красным цветом изображена сцепленная с лентой  $C$ -линия. Незакрашенными окружностями выделены точки положительного перекручивания ленты, закрашенными оранжевым цветом – отрицательного перекручивания (направление перекручивания показано стрелками)

Анализ более 20000 построенных лент и вычисленных характеризующих их коэффициентов  $\mathcal{T}$ ,  $\mathcal{W}$ ,  $\mathcal{T}_W$  и индексов  $\mathcal{N}$  и  $\mathcal{L}$  позволил авторам работы [28] утверждать, что для всех оптических лент осей эллипса поляризации индекс их внутреннего перекручивания  $\mathcal{N}$  принимает целочисленные значения тогда и только тогда, когда зацепление их контуров построения с  $C$ -линией имеет четный индекс  $\mathcal{L}_C$ , и

полуцелые значения, когда индекс  $\mathcal{L}_C$  нечетный, что соответствует неориентируемой топологии ленты. На рисунке 5 в качестве примера приведены две неориентируемые ленты, заметаемые нормированной векторной проекцией  $\vec{A}_\perp$  директора большой оси эллипса поляризации на ортогональную направлению обхода ленты плоскость, построенные вдоль контура 5 рис. 4, имеющего индекс зацепления с  $C$ -линией  $\mathcal{L}_C = 3$ . Значения индексов внутреннего перекручивания  $\mathcal{N}$  оптических лент Мебиуса, соответственно равны 1.5 (рис. 5а) и 0.5 (рис. 5б). Красным цветом изображена сцепленная с лентой  $C$ -линия. Около 60% из 20000 построенных лент имеют значения  $|\mathcal{N}| = |\mathcal{L}_C|/2$ . Для остальных 40% выполняется неравенство  $|\mathcal{N}| < |\mathcal{L}_C|/2$ .

Проведенный анализ показал, что перекручивание оптической ленты при движении вдоль контура ее построения происходит неравномерно. Резкие перекручивания ленты происходят в точках контура построения, наиболее приближенных к трем близко лежащим линиям, изображенным на рис. 5 голубым цветом, которые пересекаются в принадлежащей  $C$ -линии точке. Незакрашенными окружностями окружены точки, в которых происходит положительное перекручивание ленты. Окружности, ограничивающие закрашенную оранжевым цветом область, окружают точки, в которых происходит отрицательное перекручивание ленты. Направление перекручивания в обоих случаях показано черными стрелками. Буквой  $P$  ( $N$ ) отмечены те лучи, вблизи которых сгруппированы области положительного (отрицательного) перекручивания. Вблизи лучей, отмеченных буквой  $M$ , наблюдаются перекручивания в обоих направлениях. Для лент, обладающих свойством  $|\mathcal{N}| = |\mathcal{L}_C|/2$ , перекручивания вблизи двух из этих линий происходят в одном направлении, а вблизи третьей линии – в противоположном направлении (рис. 5а). Более редким является случай, когда вблизи двух голубых линий направления перекручивания ленты противоположны, а вблизи третьей линии присутствуют перекручивания и в одном, и в другом направлении (рис. 5б). Менее, чем для 0.2% построенных лент направления перекручиваний вблизи двух линий совпадают, а вблизи третьей – смешаны.

Отметим, что в подавляющем большинстве случаев оптические ленты, заметаемые векторами  $\vec{A}$  и  $\vec{B}$  при их прослеживании вдоль одного и того же контура имеют противоположенные знаки индекса внутреннего перекручивания  $\mathcal{N}$ . Последнее не является артефактом статистического обобщения. Как и в случае планарных контуров построения в схожей задаче рассеяния [26], для подавляющего большин-

ства контуров построения ленты векторов  $\overleftrightarrow{\mathbf{A}}$  и  $\overleftrightarrow{\mathbf{B}}$  имеют противоположные знаки  $\mathcal{N}$ .

**6. Ленты поляризации света при его острой фокусировке параболическим зеркалом.** Оптические ленты, обладающие коэффициентами перекручивания  $\mathcal{T}_W = 1/2$  и  $\mathcal{T}_W = 3/2$ , обнаружены при жесткой фокусировке (числовая апертура  $NA = 0.9$ ) неоднородно поляризованных лазерных пучков параболическим зеркалом, вблизи фокуса которого топологический каркас электрического поля имеет весьма сложную структуру линий сингулярности поляризации [35]. Неоднородно поляризованный лазерный пучок падал параллельно оси  $z$  декартовой системы координат  $xyz$  из области  $z > 0$  на вогнутое параболическое зеркало, фокус и центр которого были расположены на оси  $z$ , в точках  $z = 0$  и  $z = -f$  соответственно. Для численного расчета компонент вектора напряженности электрического поля отраженного зеркалом пучка в окрестности его геометрического фокуса авторами использовалось точное решение уравнений Максвелла в квадратурной форме, полученное в классической работе [42]. Численное моделирование проводилось в условиях, разумно соответствующих эксперименту [2]: пучок радиусом  $w = 1$  мм имел длину волны  $\lambda = 530$  нм, фокусное расстояние зеркала  $f = 1.128$  мм, числовая апертура, определенная по уровню  $e^{-2}$ , составляла  $NA = 0.9$ . Интегрирование проводилось по поверхности зеркала от  $-5f$  до  $5f$  с разрешением  $\Delta x = \Delta y = f/10$ . Расчетная область представляла собой куб со стороной 4 мкм и центром в фокусе зеркала. Разрешение вдоль каждой из осей декартовой системы координат составляло 10 нм.

Рассматривалась фокусировка параболическим зеркалом эллиптически поляризованных Гауссова и Лагерр–Гауссова пучков и двух типов пучка Пуанкаре. В последнем вектор комплексной амплитуды напряженности электрического поля задавался формулой:

$$\mathbf{E}_\perp(x, y) = E_0 \{ \mu \mathbf{e}_+ + [\Lambda_+(x + iy)/w + \Lambda_-(x - iy)/w] \mathbf{e}_- \} \exp [-(x^2 + y^2)/w^2], \quad (26)$$

где  $E_0$  – размерная константа,  $\mathbf{e}_\pm = \mathbf{e}_x \mp i\mathbf{e}_y$ ,  $\mathbf{e}_{x,y}$  – орты декартовой системы координат,  $\mu$  – вещественный коэффициент, определяющий относительный вклад гауссовой компоненты в напряженность электрического поля. Пучку Пуанкаре типа “звезда” соответствуют  $\Lambda_+ = 0$  и  $\Lambda_- = 1$ , а пучку Пуанкаре типа “лимон” –  $\Lambda_+ = 1$  и  $\Lambda_- = 0$ .

Для всех пучков падающего излучения в широком диапазоне значений их параметров в фокальной

области параболического зеркала  $C$ - и  $L$ -линии образуют нетривиальные торические узлы и зацепления [28], геометрия и топология которых определяется состоянием поляризации падающего излучения. Изменение последней, а также параметров зеркала, приводят к деформации линий сингулярности поляризации, их пересоединениям с изменением числа и топологии этих линий. Вблизи линий сингулярности поляризации в фокальной области зеркала существует большое количество оптических лент, образуемых в результате движения по окружностям радиуса  $R$  векторов  $\overleftrightarrow{\mathbf{A}}$ ,  $\overleftrightarrow{\mathbf{B}}$  и  $\mathbf{N}$ . Среди них встречаются оптические ленты с различными значениями коэффициента перекручивания, в том числе и ленты Мебиуса. Наиболее интересные из них образуются при жесткой фокусировке пучков Пуанкаре, если контуры их построения лежат в фокальной плоскости зеркала. При увеличении радиуса контура построения оптической ленты ее топология может меняться с неориентируемой на ориентируемую и обратно в зависимости от значения коэффициента зацепления между контуром построения ленты и линиями сингулярности циркулярной поляризации, входящими в топологический каркас электрического поля сфокусированного лазерного пучка.

На рисунке 6 в качестве примера изображены неориентируемые (а) и ориентируемые (б) оптические ленты директора большой оси эллипса поляризации, построенные вдоль лежащих в фокальной плоскости круглых контуров радиусом  $R$ , при острой фокусировке пучка Пуанкаре типа “звезда” ( $\mu = 3$ ). Две  $C$ -линии  $C1$  и  $C2$ , находящиеся в фокальной области параболического зеркала, изображены на нем толстыми кривыми в теплых тонах, а  $L$ -линии – тонкими в холодных тонах. Цвет  $C$ - и  $L$ -линий соответствует значениям индексов изотропии точек сингулярности поляризации электрического поля, связь которых с топологией оптических лент не рассматривалась. При малых  $R$  контур построения охватывает только линию  $C2$ , и оптическая лента является неориентируемой ( $\mathcal{T}_W = 3/2$ ). Она показана на рис. 6а (внутренняя лента). При увеличении  $R$  (но неизменности ориентации и положения центра контура построения ленты) контур начинает пересекать внутренние витки линии  $C1$ , причем вследствие симметрии электрического поля пучка Пуанкаре типа “звезда”, одновременно в трех точках. В результате коэффициент зацепления контура построения с линиями  $C1$  и  $C2$  становится четным, и оптическая лента  $\overleftrightarrow{\mathbf{A}}$  – ориентируемой (лента на рис. 6б,  $\mathcal{T}_W = 0$ ). При дальнейшем увеличении  $R$  контур построения вновь пересекает линию  $C1$  в трех точках

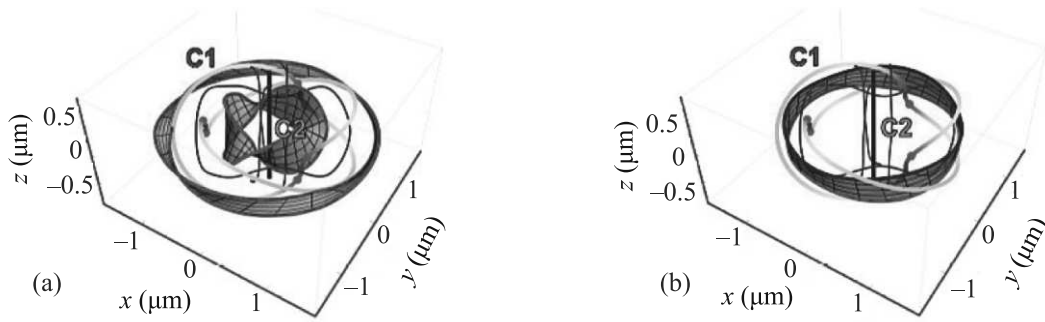


Рис. 6. (Цветной онлайн) Неориентируемые (а) и ориентируемые (б) оптические ленты  $\vec{A}$ , построенные вдоль лежащих в фокальной плоскости круглых контуров радиусами  $R_1$  ((а), внутренняя лента),  $R_2$  (б) и  $R_3$  ((а), внешняя лента) при острой фокусировке пучка Пуанкаре типа “звезда”, если  $R_1 < R_2 < R_3$ . Желто-красная и почти черная кривые –  $C$ -линии  $C1$  и  $C2$ , сине-зеленые кривые –  $L$ -линии

внешних витков, коэффициент  $\mathcal{L}_C$  становится равным единице и лента опять становится неориентируемой ( $\mathcal{T}_W = 3$ , внешняя лента на рис. 6а).

В электрическом поле сфокусированного пучка Пуанкаре типа “лимон” при малых значениях  $\mu$  также существуют оптические ленты Мебиуса директоров  $\vec{A}$  и  $\vec{B}$ , но их индекс перекручивания равен  $1/2$ . Увеличение  $R$  сопровождается изменением их топологии, происходящем при каждом пересечении контуром построения новой  $C$ -линии. Однако эти пересечения происходят по одному, а не по три одновременно, как это имеет место в случае острой фокусировки пучка Пуанкаре типа “звезда”. Форма и свойства отдельных лент качественно совпадают с найденными ранее численно и обнаруженными в эксперименте [2].

**7. Топология лент эллипсов поляризации в электромагнитном поле лазерного излучения, распространяющегося в планарном метаматериале.** В [43, 36] с использованием метода конечных элементов высокого порядка проведено численное моделирование взаимодействия эллиптически поляризованного монохроматического излучения с обладающим ярко выраженными дисперсионными свойствами планарным метаматериалом, базовый элемент которого состоит из двух серебряных полосок, расположенных на расстоянии 70 нм друг от друга и имеющих форму параллелепипедов размерами  $65 \times 150 \times 20$  нм и  $65 \times 135 \times 20$  нм. Период структуры в направлениях, перпендикулярных волновому вектору падающей эллиптически поляризованной плоской монохроматической волны ( $\lambda = 690$  нм), был одинаков и равен 520 нм. Комплексная диэлектрическая проницаемость металла  $\tilde{\epsilon} = 1 - \omega_p^2 / [\omega(\omega - i\gamma)]$ , где  $\omega_p = 1.366$  рад  $\cdot$  с $^{-1}$  – плазменная частота, а  $\gamma = 3.07 \cdot 10^{13}$  с $^{-1}$  – коэффициент затухания. Диэлектрическая проницаемость материала, окружающего полоски, считается равной единице.

Алгоритмы нахождения удовлетворяющего уравнению

$$\text{rot rot} \mathbf{E} - \frac{\omega^2}{c^2} [\hat{\epsilon} \mathbf{E}] = 0, \quad (27)$$

комплексного вектора напряженности  $\mathbf{E}$  электрического поля распространяющейся в метаматериале волны и построения оптических лент поляризации подробно описаны в [36, 43].

Было зафиксировано наличие достаточно длинной (по сравнению с размерами металлических полосок) линии сингулярности циркулярной поляризации, имеющей две точки, вблизи которых различные ее сегменты сближаются на расстояние, сопоставимое с пространственным разрешением метода ее обнаружения. Ленты, построенные вдоль окружающих  $C$ -линию контуров в виде окружностей малого радиуса ( $R \leq 10$  нм), плоскости которых ортогональны касательным к  $C$ -линии, вдали от областей максимального близкого сближения двух ее отдельных частей имеют топологию лент Мебиуса. Модули векторов, определяющих оси эллипса поляризации, заметно изменяются в них вдоль контуров их построения. В случае, когда радиус окружности такой, что она охватывает одновременно два сегмента  $C$ -линии (это происходит в областях максимального сближения отдельных частей линии сингулярности круговой поляризации), оптические ленты поляризации являются ориентируемыми поверхностями.

На рисунке 7 в качестве примера приведены оптические ленты директора большой оси эллипса поляризации, построенные вдали (ленты (а) и (д), имеющие топологию лент Мебиуса) и вблизи (ленты (б) и (с), являющиеся ориентируемыми поверхностями) области максимального сближения сегментов  $C$ -линии. Для лучшей видимости сцепленные с  $C$ -линией ленты (построенные при  $R = 10$  нм) на рис. 7

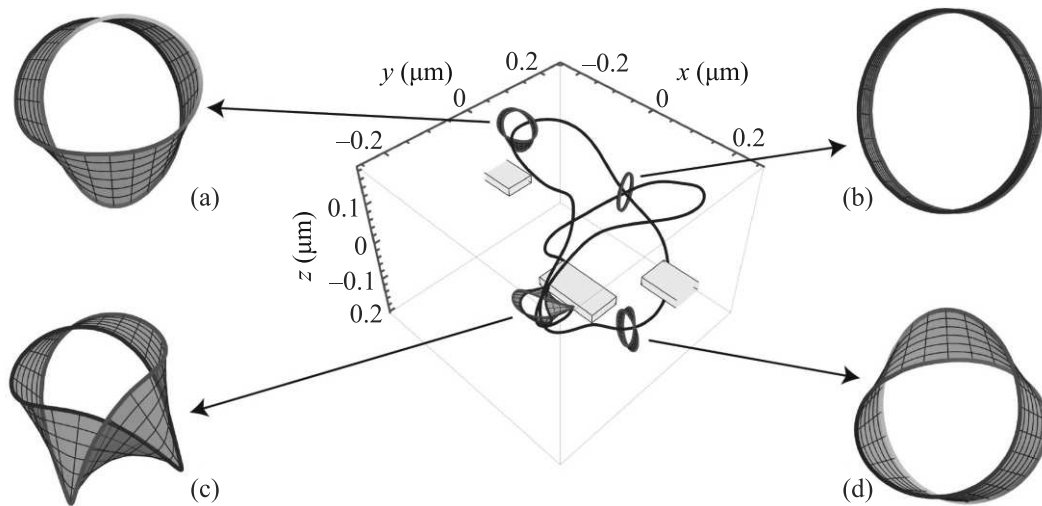


Рис. 7. (Цветной онлайн) Оптические ленты директора большой оси эллипса поляризации, построенные вдали (ленты (a) и (d)) и вблизи (ленты (b) и (c)) областей максимального сближения сегментов  $C$ -линии, окрашенной в фиолетовый цвет

увеличены в размерах при полном сохранении их характерных особенностей.

**8. Заключение.** Оптические ленты являются интереснейшим примером топологически нетривиальных структур электромагнитного поля лазерного излучения. Количество работ, в которых сообщается о демонстрации все новых и новых оптических лент поляризации и об их уникальных свойствах увеличивается с каждым месяцем. В ряде случаев они необыкновенно красивы. Так получены лента Мебиуса в форме сердца, двойная лента Мебиуса в форме цифры “8”, круглые ленты Мебиуса с различной скоростью скручивания поляризации [3] и многие другие. Ограниченный объем настоящей статьи не позволяет рассказать обо всех. Теоретическое описание условий появления и топологических свойств оптических лент поляризации представляется достаточно сложной, но весьма интересной задачей. Ее решение способствует лучшему пониманию тонких особенностей распространения света в различных оптических устройствах и его взаимодействия с веществом. Наряду с экспериментами по генерации лент поляризации теоретические работы стимулируют новые исследования, направленные на практическое их применение в различных задачах нанофотоники, например, в производстве метаматериалов с экзотическими оптическими свойствами, а также для создания уникальных оптических устройств, к которым можно отнести пинцеты для манипуляций с крошечными частицами материи. В частности, микрорезонаторы в виде ленты Мебиуса перспективны в новых классических и квантовых фотонных приложениях

(см., например, [44], где сообщается об экспериментальном наблюдении оптических фаз Берри, возникающих в микрорезонаторах в виде ленты Мебиуса с заданной геометрией поперечного сечения). Особенности оптических лент поляризации характерны для любого сложного векторного поля. Они естественным образом появляются и в неоднородных, но монохроматических, звуковых и поверхностных волновых полях в жидкостях или газах [45] (например, гравитационных или капиллярных). Отдельный интерес представляют оптические ленты в задачах нелинейной оптики, в которых появление точек сингулярности поляризации происходит в процессе нелинейного оптического преобразования регулярных эллиптически поляризованных пучков и импульсов [46].

**Финансирование работы.** Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда (РНФ) # 23-22-00019.

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

1. I. Freund, *Opt. Commun.* **249**, 7 (2005).
2. T. Bauer, P. Banzer, E. Karimi, S. Orlov, A. Rubano, L. Marrucci, E. Santamato, R.W. Boyd, and G. Leuchs, *Science* **347**, 964 (2015).
3. C. Wan and Q. Zhan, *Opt. Express* **27**, 11516 (2019).
4. K. Tekce, E. Otte, and C. Denz, *Opt. Express* **27**, 29685 (2019).
5. I. Freund, *Opt. Lett.* **45**, 3333 (2020).
6. E.J. Galvez, I. Dutta, K. Beach, J.J. Zeosky, J. A. Jones, and B. Khajavi, *Sci. Rep.* **7**, 13653 (2017).

7. F. Bouchard, H. Mand, M. Mirhosseini, E. Karimi, and R. W. Boyd, *New J. Phys.* **16**, 123006 (2014).
8. N. Radwell, R. D. Hawley, J. B. Götte, and S. Franke-Arnold, *Nat. Commun.* **7**, 10564 (2016).
9. F. Cardano, E. Karimi, S. Slussarenko, L. Marrucci, C. de Lisio, and E. Santamato, *Appl. Opt.* **51**, C1 (2012).
10. F. Cardano, E. Karimi, L. Marrucci, C. de Lisio, and E. Santamato, *Opt. Express* **21**, 8815 (2013).
11. Z. Bomzon, V. Kleiner, and E. Hasman, *Opt. Lett.* **26**, 1424 (2001).
12. H. Larocque, J. Gagnon-Bischoff, F. Bouchard, R. Fickler, J. Upham, R. W. Boyd, and E. Karimi, *J. Opt.* **18**, 124002 (2016).
13. D. Sugic and M. R. Dennis, *JOSA A* **35**, 1987 (2018).
14. H. Larocque, A. D'Errico, M. F. Ferrer-Garcia, A. Carmi, E. Cohen, and E. Karimi, *Nat. Commun.* **11**, 5119 (2020).
15. J. Zhong, S. Liu, X. Guo, P. Li, B. Wei, L. Han, S. Qi, and J. Zhao, *Opt. Express* **29**, 38849 (2021).
16. I. Freund, *Opt. Commun.* **283**, 1 (2010).
17. I. Freund, *Opt. Commun.* **283**, 16 (2010).
18. I. Freund, *Opt. Lett.* **35**, 148 (2010).
19. J. F. Nye, *Natural Focusing and Fine Structure of Light*, Institute of Physics Publishing, Bristol and Philadelphia (1999).
20. M. V. Berry, *Journal of Optics A: Pure and Applied Optics*, **6**, 675 (2004).
21. M. R. Dennis, *Opt. Lett.* **33**, 2572 (2008).
22. K. S. Grigoriev, N. Yu. Kuznetsov, Yu. V. Vladimirova, and V. A. Makarov, *Phys. Rev. A* **98**, 063805 (2018).
23. I. Freund, *Opt. Commun.* **199**, 47 (2001).
24. J. F. Nye and J. V. Hajnal, *Proc. R. Soc. A* **409**, 1836 (1987).
25. A. Garcia-Etxarri, *ACS Photonics* **4**, 1159 (2017).
26. N. Yu. Kuznetsov, K. S. Grigoriev, and V. A. Makarov, *Phys. Rev. A* **104**, 043505 (2021).
27. M. R. Dennis, *Opt. Lett.* **36**, 3765 (2011).
28. N. Yu. Kuznetsov, K. S. Grigoriev, and V. A. Makarov, *Laser Phys. Lett.* **20**, 085401 (2023).
29. K. S. Grigoriev and V. A. Makarov, *Opt. Lett.* **48**, 4420 (2023).
30. I. Freund, *Opt. Lett.* **36**, 4506 (2011).
31. T. Bauer, M. Neugebauer, G. Leuchs, and P. Banzer, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 013601 (2016).
32. T. Bauer, P. Banzer, F. Bouchard, S. Orlov, L. Marrucci, E. Santamato, R. W. Boyd, E. Karimi, and G. Leuchs, *New J. Phys.* **21**, 053020 (2019).
33. S. Kumar Pal, L. Somers, R. Kumar Singh, P. Senthilkumaran, and A. Arie, *Phys. Scr.* **98**, 055507 (2023).
34. V. V. Kotlyar, S. S. Stafeev, and A. G. Nalimov, *Computer Optics* **45**, 800 (2021).
35. N. Yu. Kuznetsov, A. E. Ryadchenko, K. S. Grigoriev, and V. A. Makarov, *Phys. Rev. A* **107**, 063506 (2023).
36. N. Yu. Kuznetsov, N. N. Potravkin, and V. A. Makarov, *Laser Phys. Lett.* **21**, 055401 (2024).
37. O. O'Reilly, *Link, Writhe, and Twist*, Springer International Publishing, Cham, Switzerland (2017).
38. J. J. Stoker, *Differential Geometry*, in series *Pure and Applied Mathematics*, Wiley-Interscience, Hoboken, New Jersey (2011), v. 20.
39. R. L. Bishop, *Am. Math. Mon.* **82**, 246 (1975).
40. G. Călugăreanu, *Czechoslovak Mathematical Journal* **11**, 588 (1961).
41. E. D. Chubchev, Yu. V. Vladimirova, and V. N. Zadkov, *Opt. Express* **22**, 20432 (2014).
42. P. Varga and P. Török, *JOSA A* **17**, 2090 (2000).
43. N. N. Potravkin, I. A. Perezhogin, N. Yu. Kuznetsov, K. S. Grigoriev, and V. A. Makarov, *Laser Phys. Lett.* **15**, 115403 (2018).
44. J. Wang, S. Valligatla, Y. Yin, L. Schwarz, M. Medina-Sánchez, S. Baunack, Ch. Hua Lee, R. Thomale, S. Li, V. M. Fomin, L. Ma, and O. G. Schmidt, *Nat. Photonics* **17**, 120 (2023).
45. K. Yu. Bliokh, M. A. Alonso, D. Sugic, M. Perrin, F. Nori, and E. Brasselet, *Phys. Fluids* **33**, 077122 (2021).
46. K. S. Grigoriev and V. A. Makarov, *JETP Lett.* **109**, 642 (2019).



# Столкновения световых пуль разной круговой поляризации

В. П. Рубан<sup>1)</sup>

*Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН, 142432 Черногловка, Россия*

Поступила в редакцию 20 февраля 2024 г.

После переработки 10 марта 2024 г.

Принята к публикации 11 марта 2024 г.

Для локально изотропной фокусирующей керровской среды с аномальной хроматической дисперсией численно промоделированы столкновения лево- и право-поляризованных пространственно-временных оптических солитонов. Устойчивое распространение таких “световых пуль” в умеренно нелинейном режиме обеспечивается поперечным параболическим профилем показателя преломления внутри многомодового волновода. В таких системах поперечное движение центров масс волновых пакетов происходит по классическим траекториям двумерного гармонического осциллятора, а продольное движение — равномерно. Поэтому столкновения двух солитонов могут быть не только “лобовыми”, но и “касательными”. Результатом неупругого столкновения солитонов с противоположными круговыми поляризациями могут оказаться как две разлетающиеся бинарные световые пули, содержащие в себе правую и левую поляризации в некоторой пропорции, так и более сложные связанные структуры.

DOI: 10.31857/S1234567824080020, EDN: BZELAX

**Введение.** В нелинейной оптике на протяжении уже нескольких десятилетий исследуется проблема пространственно-временных оптических солитонов (см. [1–9] и многочисленные ссылки там). Такие локализованные в трех измерениях и устойчиво распространяющиеся когерентные структуры получили специальное название “световые пули” (light bullets) [1–3]. Трудность здесь заключается в том, что базисная математическая модель для квазиоднохроматической световой волны в Керровской среде — нелинейное уравнение Шредингера (НУШ) — не обладает устойчивыми решениями солитонного типа в трехмерном однородном пространстве. Волновой пакет либо расплывается за счет дисперсии и дифракции, либо коллапсирует за счет нелинейности (см. [8–11] и ссылки там). По этой причине необходим дополнительный стабилизирующий фактор. Это может быть насыщающаяся нелинейность, пространственная неоднородность и т.д. (см., например, [4, 6, 7, 12–22]). В частности, при распространении волны в много-модовом световоде с плавным (примерно параболическим) профилем показателя преломления эффективный поперечный потенциал удерживает умеренно нелинейный волновой пакет от дифракционного (поперечного) расплывания, а в продольном (временном) направлении аномальная хроматическая дисперсия устойчиво уравновешивается ставшей эффективно одномерной нелинейностью [2, 3, 5, 8, 9]. При этом поперечные степени

свободы не заморожены, в отличие от ситуации в одномодовых оптических волокнах. В результате установившегося баланса оказываются устойчивыми световые пули с не слишком большой полной энергией. Кроме того, центр масс такого солитона может вполне известным образом (по траекториям классического осциллятора) смещаться в поперечном направлении, так что режим его движения является промежуточным между жесткой поперечной фиксацией в одномодовом волокне и полной свободой в однородном пространстве.

Но обычное скалярное НУШ описывает только одну поляризацию света — линейную либо круговую. Для локально изотропной керровской среды встает вопрос о нелинейном взаимодействии между волнами двух поляризаций. В этом случае адекватной является система из двух некогерентно связанных НУШ для медленных комплексных амплитуд лево- и право-поляризованных по кругу волн [23]. Соответственно, появляется необходимость рассмотреть задачу о комбинированных солитонах, то есть о таких устойчивых нелинейных уединенных структурах, которые содержат в себе обе круговые поляризации, причем, вообще говоря, — в произвольной пропорции. Важно также получить представление о процессах, происходящих при столкновениях трехмерных оптических солитонов с разной поляризацией. Насколько известно автору, ранее подобные задачи исследовались только в одномерной постановке. Для неупругих столкновений одномерных векторных солитонов были получены весьма нетривиальные ре-

<sup>1)</sup>e-mail: ruban@itp.ac.ru

зультаты (см., например, [24–26] и ссылки там). Еще более интересной динамики следует ожидать в трех измерениях.

В данной работе проведен вариационный анализ, результаты которого говорят в пользу возможности существования умеренно нелинейных бинарных световых пучков. Трехмерное численное моделирование подтвердило их устойчивую природу. Проведен также ряд численных экспериментов по лобовым и касательным столкновениям между трехмерными световыми пучками с противоположными круговыми поляризациями. Процессы, происходящие в ходе этих неупругих столкновений, коренным образом отличаются от взаимодействия одинаково поляризованных солитонов. Выяснилось, что в зависимости от параметров столкновения, его результатом могут стать две разлетающиеся (с измененными скоростями) бинарные световые пучки, а иногда сталкивающиеся солитоны “слипаются”, образовав нестационарную структуру более сложного типа. При некоторых начальных параметрах случается волновой коллапс.

**Основные свойства модели.** Рассмотрим прозрачную оптическую среду с фокусирующей керровской нелинейностью и с законом дисперсии линейных волн  $k(\omega) = \sqrt{\varepsilon(\omega)}\omega/c$ , в котором имеется диапазон частот с аномальной дисперсией  $k''(\omega) < 0$ . Например, многие стекла обладают указанными свойствами. В качестве основной модели возьмем известное уравнение для векторной огибающей слабонелинейной квазимонохроматической световой волны (с несущей частотой  $\omega_0$ ) в параксиальном приближении. В размерных переменных уравнение имеет вид

$$2k_0[-i\partial_\zeta - ik'_0\partial_t + k''_0\partial_t^2/2]\mathbf{E} - \Delta_\perp\mathbf{E} \approx \quad (1)$$

$$\approx \frac{k_0^2}{\varepsilon(\omega_0)} \left[ \tilde{\varepsilon}(x, y, \zeta)\mathbf{E} + \alpha(\omega_0)|\mathbf{E}|^2\mathbf{E} + \beta(\omega_0)(\mathbf{E} \cdot \mathbf{E})\mathbf{E}^* \right],$$

где  $\zeta$  – координата вдоль пучка,  $k'_0 = 1/v_{\text{гр}}$  – обратная групповая скорость света в среде,  $k''_0$  – отрицательный коэффициент хроматической дисперсии,  $\tilde{\varepsilon}(x, y, \zeta)$  – малая неоднородность диэлектрической проницаемости на несущей частоте,  $\alpha$  и  $\beta$  – положительные нелинейные коэффициенты. Пусть  $\tau = t - \zeta/v_{\text{гр}}$  – “запаздывающее” время. В терминах медленных амплитуд  $\psi_{1,2}(x, y, \tau, \zeta)$  левой и правой круговых поляризаций амплитуда электрического поля есть

$$\mathbf{E} \approx [(\mathbf{e}_x + i\mathbf{e}_y)\psi_1 + (\mathbf{e}_x - i\mathbf{e}_y)\psi_2]/\sqrt{2}, \quad (2)$$

и тогда свет описывается двумя связанными скалярными НУШ [23], аналогично бинарному бозеконденсату холодных атомов (при замене перемен-

ных  $\zeta \rightarrow t, \tau \rightarrow z$ ). При надлежащем перемасштабировании получается безразмерная система

$$i\frac{\partial\psi_{1,2}}{\partial\zeta} = \left[ -\frac{1}{2}\Delta + U(x, y, \zeta) - |\psi_{1,2}|^2 - g|\psi_{2,1}|^2 \right] \psi_{1,2}, \quad (3)$$

где  $\Delta = \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_\tau^2$  – трехмерный оператор Лапласа в “координатном” пространстве  $\mathbf{r} = (x, y, \tau)$ . Параметр перекрестной фазовой модуляции  $g = 1 + 2\beta/\alpha \approx 2$  в типичном случае быстрого нелинейного отклика. Здесь важно подчеркнуть, что только при выборе базиса в виде круговых поляризаций нелинейное взаимодействие между двумя компонентами сводится к простой некогерентной связи посредством коэффициента  $g$ . Такая связь сохраняет количество каждой компоненты  $N_{1,2} = \int |\psi_{1,2}|^2 dx dy d\tau$  и позволяет применять высокоэффективный численный метод Фурье с расщепленным шагом (split-step Fourier method), о чем будет сказано далее. Если же взять две линейные либо две эллиптические поляризации, то в системе остались бы нелинейные слагаемые, соответствующие так называемому четырехволновому смещению. Такие слагаемые были бы неудобны как с аналитической точки зрения (поскольку они приводят к переходам между компонентами), так и с численной точки зрения, за исключением очевидной редукции  $\psi_2 = \psi_1 \exp(i\delta_0)$ , которая отвечает строго линейной поляризации.

Запишем параболический внешний потенциал  $U \propto -\tilde{\varepsilon}(x, y, \zeta)$  в компактном матрично-векторном виде

$$U(x, y, \zeta) = \frac{\mathbf{r} \cdot \hat{S}(\zeta)\mathbf{r}}{2} - \mathbf{r} \cdot \mathbf{F}(\zeta) + U_0(\zeta), \quad (4)$$

с симметричной матрицей  $\hat{S}(\zeta)$  (у которой отличны от нуля только поперечные компоненты), с (поперечным) вектором  $\mathbf{F}(\zeta)$  и скаляром  $U_0(\zeta)$ . Функции  $\mathbf{F}(\zeta)$  и  $U_0(\zeta)$  учитывают возможные отклонения центральной линии световода от оси  $\zeta$ , а также вариации глубины потенциальной ямы.

По сути, связанные НУШ (3) представляют собой гидродинамическую систему для двух взаимодействующих между собой идеальных сжимаемых жидкостей, течения которых потенциальны. Переход к соответствующим гидродинамическим переменным – плотностям  $I_{1,2}$  и потенциалам скоростей  $\varphi_{1,2}$  – осуществляется преобразованием Маделунга

$$\psi_s = \sqrt{I_s} \exp(i\varphi_s), \quad s = 1, 2.$$

Аналогичная система уравнений, но с дефокусирующей нелинейностью, была рассмотрена в недавней работе [27]. В дефокусирующем случае положи-

тельное “гидродинамическое” давление поддерживает делокализованный фон плотности, а основными “мягкими” когерентными структурами являются квантованные вихри, а также доменные стенки между двумя круговыми поляризациями. Здесь же исследуется фокусирующая нелинейность, и основной интерес представляют солитоноподобные объекты, в которых отрицательное гидродинамическое давление (натяжение) уравновешивается “квантовым” давлением (т.е. дисперсией) в продольном направлении, тогда как в поперечном направлении слегка ослабленная гидродинамическим натяжением дифракция противостоит поперечному удерживающему потенциалу.

Для нас еще важно, что в квадратичном внешнем потенциале движение центра масс какого-либо локализованного распределения жидкостей происходит в соответствии с уравнением классического осциллятора (ср. с [28]),

$$\mathbf{R}''_{c.m.} = -\hat{S}(\zeta)\mathbf{R}_{c.m.} + \mathbf{F}(\zeta), \quad (5)$$

где два штриха обозначают вторую производную по переменной  $\zeta$ . В некоторых случаях траектория этого движения может быть довольно нетривиальной, например, при вращающемся анизотропном потенциале, когда переход во вращающуюся систему координат добавляет силу Кориолиса и центробежную силу. Интересна также периодическая зависимость собственных значений матрицы  $\hat{S}(\zeta)$ , когда создаются условия для параметрического резонанса. Но даже и обычный анизотропный двумерный осциллятор с постоянной матрицей  $\hat{S} = \text{Diag}\{\kappa_1^2, \kappa_2^2, 0\}$  “выдает” фигуры Лиссажу. При этом весьма существенно, что “внутренняя” динамика локализованной структуры никак не “чувствует” движения центра масс. Действительно, рассмотрим слегка “укороченную” вспомогательную систему уравнений без членов с  $\mathbf{F}(\zeta)$  и  $U_0(\zeta)$ ,

$$i\frac{\partial\Psi_{1,2}}{\partial\zeta} = \left[ -\frac{1}{2}\Delta + \frac{\mathbf{r} \cdot \hat{S}(\zeta)\mathbf{r}}{2} - |\Psi_{1,2}|^2 - g|\Psi_{2,1}|^2 \right] \Psi_{1,2}. \quad (6)$$

Легко убедиться в том, что функции

$$\psi_s = \Psi_s(\mathbf{r} - \mathbf{R}(\zeta), \zeta) \exp[i(\mathbf{r} - \mathbf{R}(\zeta)) \cdot \mathbf{P}(\zeta) - i\gamma(\zeta)] \quad (7)$$

удовлетворяют полной системе (3) при условиях

$$\mathbf{R}' = \mathbf{P}, \quad (8)$$

$$\mathbf{P}' = -\hat{S}(\zeta)\mathbf{R} + \mathbf{F}(\zeta), \quad (9)$$

$$\gamma' = -\frac{\mathbf{P}^2}{2} + \frac{\mathbf{R} \cdot \hat{S}(\zeta)\mathbf{R}}{2} - \mathbf{R} \cdot \mathbf{F} + U_0(\zeta). \quad (10)$$

Первые два условия есть уравнения движения классического осциллятора при наличии вынуждающей силы  $\mathbf{F}(\zeta)$ . Без ограничения общности можно считать, что  $\Psi_{1,2}$  соответствуют покоящемуся центру масс, и тогда становится очевидным полное отсутствие влияния движения центра масс на внутреннюю динамику, как и для обычного НУШ [28].

**Гауссов вариационный анзац.** Сама эта внутренняя динамика может быть довольно сложной, особенно при наличии обеих поляризаций. В частности, представляет несомненный интерес комбинированный солитон, содержащий в себе две компоненты в количествах  $N_1$  и  $N_2$ . Ранее такие бинарные световые пули не исследовались. Чтобы получить общее представление о свойствах этих объектов хотя бы в простейшем случае двух симметричных волновых пакетов с совпадающими центрами, воспользуемся вариационным приближением. Наша система (3) соответствует лагранжиану

$$\mathcal{L} = \frac{i}{2} \int \sum_{s=1,2} (\Psi_s^* \Psi'_s - \Psi_s \Psi'^*_s) dx dy d\tau - \mathcal{H}, \quad (11)$$

с гамильтоновым функционалом

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \int \left[ \sum_{s=1,2} (|\nabla\Psi_s|^2 + \mathbf{r} \cdot \hat{S}\mathbf{r}|\Psi_s|^2 - |\Psi_s|^4) - 2g|\Psi_1|^2|\Psi_2|^2 \right] dx dy d\tau. \quad (12)$$

По аналогии с однокомпонентным НУШ, подставим в лагранжиан пробные функции в виде гауссовых волновых пакетов,

$$\Psi_s = \sqrt{N_s} \left( \frac{\det \hat{A}_s}{\pi^3} \right)^{\frac{1}{4}} \times \exp \left( -\frac{\mathbf{r} \cdot \hat{A}_s(\zeta)\mathbf{r}}{2} - i\frac{\mathbf{r} \cdot \hat{B}_s(\zeta)\mathbf{r}}{2} - i\phi_s(\zeta) \right), \quad (13)$$

с неизвестными симметричными матрицами  $\hat{A}_s(\zeta)$  и  $\hat{B}_s(\zeta)$ , а также с неизвестными фазами  $\phi_s(\zeta)$ . Подчеркнем, что матрицы  $\hat{A}_s(\zeta)$  и  $\hat{B}_s(\zeta)$ , вообще говоря, не предполагаются диагональными, в отличие от большинства работ, применяющих вариационный метод к НУШ. Гауссовы интегралы легко вычисляются в общем виде и приводят к лагранжевой системе с конечным числом степеней свободы:

$$4L = \sum_{s=1,2} [N_s \text{Tr}(\hat{A}_s^{-1}\hat{B}'_s) + N_s \phi'_s] - 4H, \quad (14)$$

$$4H = \sum_{s=1,2} \left[ N_s \text{Tr}(\hat{A}_s^{-1} \hat{B}_s^2 + \hat{A}_s + \hat{A}_s^{-1} \hat{S}) - \frac{2N_s^2}{\sqrt{8\pi^3}} (\det \hat{A}_s)^{\frac{1}{2}} \right] - 4g \frac{N_1 N_2}{\sqrt{\pi^3}} [\det(\hat{A}_1^{-1} + \hat{A}_2^{-1})]^{-\frac{1}{2}}. \quad (15)$$

Очевидно, что взаимодействие между поляризациями происходит через последнее слагаемое.

Как и положено, переменные  $N_s$  оказываются интегралами движения. Уравнения для матриц  $A_s(\zeta)$  и  $\hat{B}_s(\zeta)$  имеют структуру

$$\hat{A}'_s = (4/N_s) \hat{A}_s (\partial H / \partial \hat{B}_s) \hat{A}_s, \quad (16)$$

$$\hat{B}'_s = (4/N_s) (\partial H / \partial \hat{A}_s^{-1}). \quad (17)$$

Явный вид частных производных по элементам матрицы  $\hat{A}_s^{-1}$  легко находится при помощи математических соотношений  $d \text{Tr} \hat{M} = -\text{Tr}(\hat{M}^2 d\hat{M}^{-1})$  и  $d \det \hat{M} = -\det \hat{M} \text{Tr}(\hat{M} d\hat{M}^{-1}) = \det \hat{M} \text{Tr}(\hat{M}^{-1} d\hat{M})$ , где  $\hat{M}$  – произвольная симметричная матрица. В результате имеем систему обыкновенных дифференциальных уравнений в компактной матричной форме:

$$\hat{A}'_s = \hat{A}_s \hat{B}_s + \hat{B}_s \hat{A}_s, \quad (18)$$

$$\hat{B}'_s = \hat{B}_s^2 - \hat{A}_s^2 + \hat{S} + \frac{N_s}{\sqrt{8\pi^3}} (\det \hat{A}_s)^{\frac{1}{2}} \hat{A}_s + 2g \frac{N_{3-s}}{\sqrt{\pi^3}} [\det(\hat{A}_1^{-1} + \hat{A}_2^{-1})]^{-\frac{1}{2}} (\hat{A}_1^{-1} + \hat{A}_2^{-1})^{-1}. \quad (19)$$

В общем виде эта система все еще довольно сложна для подробного анализа. Но если ограничиться только диагональными матрицами  $\hat{S}(\zeta)$ ,  $\hat{A}_s(\zeta)$  и  $\hat{B}_s(\zeta)$ , положив при этом  $\hat{A}_s^{-1} = \text{Diag}\{a_s^2, b_s^2, c_s^2\}$ , то для “векторов”  $\mathbf{a}_s = (a_s, b_s, c_s)$  получается ньютоновская динамика

$$\tilde{N}_s \mathbf{a}_s'' = -\partial \tilde{W} / \partial \mathbf{a}_s, \quad (20)$$

где введены чуть более удобные величины  $\tilde{N}_s = N_s / \sqrt{8\pi^3}$ , а потенциальная энергия  $\tilde{W}$  имеет вид

$$\begin{aligned} \tilde{W} &= \frac{2W}{\sqrt{8\pi^3}} = \\ &= \sum_{s=1,2} \left[ \frac{\tilde{N}_s}{2} \left( \frac{1}{a_s^2} + \frac{1}{b_s^2} + \frac{1}{c_s^2} + \kappa_1^2 a_s^2 + \kappa_2^2 b_s^2 \right) - \frac{\tilde{N}_s^2}{a_s b_s c_s} \right] - \\ &\quad - \frac{2g \tilde{N}_1 \tilde{N}_2 \sqrt{8}}{\sqrt{(a_1^2 + a_2^2)(b_1^2 + b_2^2)(c_1^2 + c_2^2)}}. \quad (21) \end{aligned}$$

Для однокомпонентного НУШ соответствующая динамическая система подробно изучена (см., например, [2, 3, 8, 9, 29]); при этом надо отметить, что в диагональном вариационном анзаце продольная зависимость иногда выбирается не в гауссовой форме,

а в форме  $1/\cosh[\tau/c(\zeta)]$ ; потенциалы  $W$  при этом оказываются достаточно схожими).

Если  $\kappa_1^2$  и  $\kappa_2^2$  не зависят от эволюционной переменной  $\zeta$ , то локальный минимум функции  $\tilde{W}$  определяет равновесную конфигурацию бинарной световой пули. В осесимметричном случае (когда  $\kappa_1^2 = \kappa_2^2 = 1$ ) с очевидностью  $a_s = b_s$ , и тогда вместо шести переменных остается всего четыре. Качественный результат при этом такой же, как и для однокомпонентного солитона – в некоторой области не слишком больших параметров  $\tilde{N}_1$  и  $\tilde{N}_2$  у функции  $\tilde{W}$  имеется устойчивое положение равновесия. При этом, если  $\tilde{N}_1 > \tilde{N}_2$ , то  $a_1 > a_2$  и  $c_1 > c_2$ , т.е. более слабая компонента локализована чуть сильнее. Это и понятно, так как при  $I_2 \ll I_1$  нелинейная потенциальная яма ( $-I_2 - gI_1$ ) для слабой компоненты оказывается глубже, чем яма ( $-I_1 - gI_2$ ) для сильной компоненты – за счет параметра  $g > 1$ .

**3D численное моделирование.** Для проверки выводов вариационного анализа и исследования столкновений солитонов было проведено прямое численное моделирование системы (3) стандартным методом Фурье с расщепленным шагом по переменной  $\zeta$  второго порядка аппроксимации. Вычислительная область имела размеры  $(4\pi) \times (4\pi)$  в поперечных направлениях (по  $x$  и  $y$ ) и  $8\pi$  либо  $12\pi$  в продольном направлении (по  $\tau$ ). Шаг решетки  $h = 4\pi/128 \sim 0.1$  по “пространству”  $(x, y, \tau)$  совместно с эволюционным шагом  $\delta\zeta = 0.002$  обеспечивали достаточно хорошее разрешение гладких волновых полей (при отсутствии коллапса) и сохранение гамильтониана с точностью до четырех–шести десятичных знаков на всей дистанции распространения в несколько сот безразмерных единиц по  $\zeta$ . Эксперимент прекращался, если начинался резкий и сильный (в несколько раз) рост максимальной интенсивности в преддверии коллапса, хотя пространственное разрешение при этом все еще оставалось приемлемым. Поэтому сам процесс коллапса в данной работе не моделировался.

На рисунках 1а–с показаны численные примеры зависимостей максимальной интенсивностей первой и второй компоненты бинарного волнового пакета с гауссовыми начальными условиями. Как и следовало ожидать, детального соответствия с гауссовым приближением не получилось. В компьютерных экспериментах быстро возбуждались “неучтенные” гауссианом степени свободы, что обусловлено несовершенством начальных условий. Но важно, что дальнейшего усиления этих возмущений на длинных дистанциях не происходило, так что сама идея устойчивого распространения бинарных световых пуль успешно прошла численную проверку.

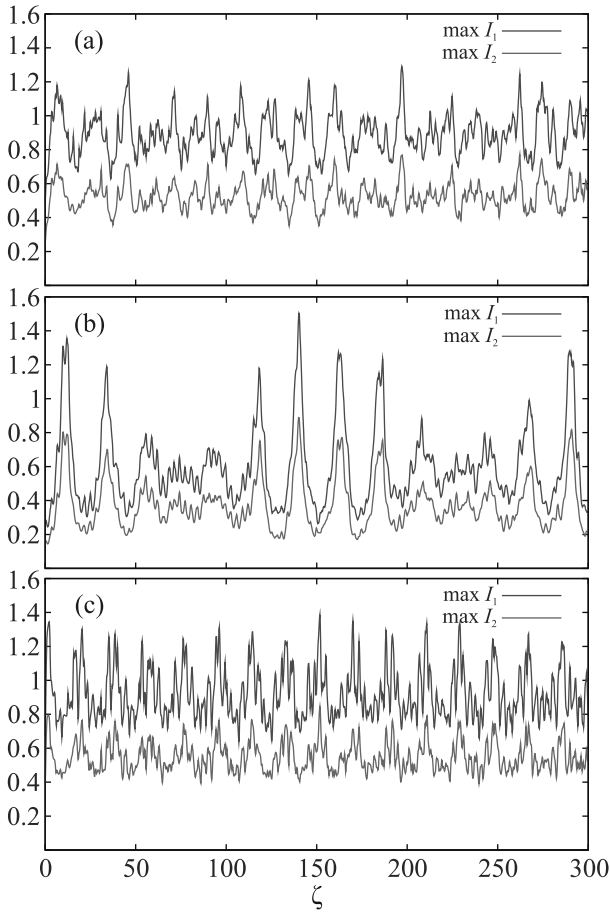


Рис. 1. (Цветной онлайн) Численные зависимости максимальных интенсивностей левой и правой компоненты нелинейного бинарного волнового пакета с  $N_1 = 3.8$ ,  $N_2 = 1.9$  и гауссовыми начальными условиями при  $a_1^2 = b_1^2 = a_2^2 = b_2^2 = 0.8$ . Значения остальных начальных параметров: (а) –  $c_1^2 = 3.0$ ,  $c_2^2 = 3.0$ ; (б) –  $c_1^2 = 10.0$ ,  $c_2^2 = 8.0$ ; (с) –  $c_1^2 = 1.6$ ,  $c_2^2 = 1.2$

При периодических зависимостях коэффициентов квадратичного потенциала типа  $\kappa_1^2(\zeta) = 1 + \epsilon_1 \cos(2\zeta)$  и  $\kappa_2^2(\zeta) = 1 + \epsilon_2 \cos(2\zeta)$ , с малыми параметрами  $\epsilon_1$  и  $\epsilon_2$ , в системе имеет место параметрический резонанс, так же, как и в однокомпонентном случае (см. [30, 31] и ссылки там). Компьютерное моделирование уравнений (3) в самом деле продемонстрировало параметрическую “раскачку” размеров бинарного солитона и сильный рост его энергии, вплоть до того, что в фазе расширения поперечный размер солитона уже “не помещался” в вычислительной области. Но, поскольку в проведенных численных экспериментах не было замечено каких-либо бросающихся в глаза различий между параметрическими резонансами солитонов с одной и с двумя поляризациями, мы эту тему пока оставим в стороне.

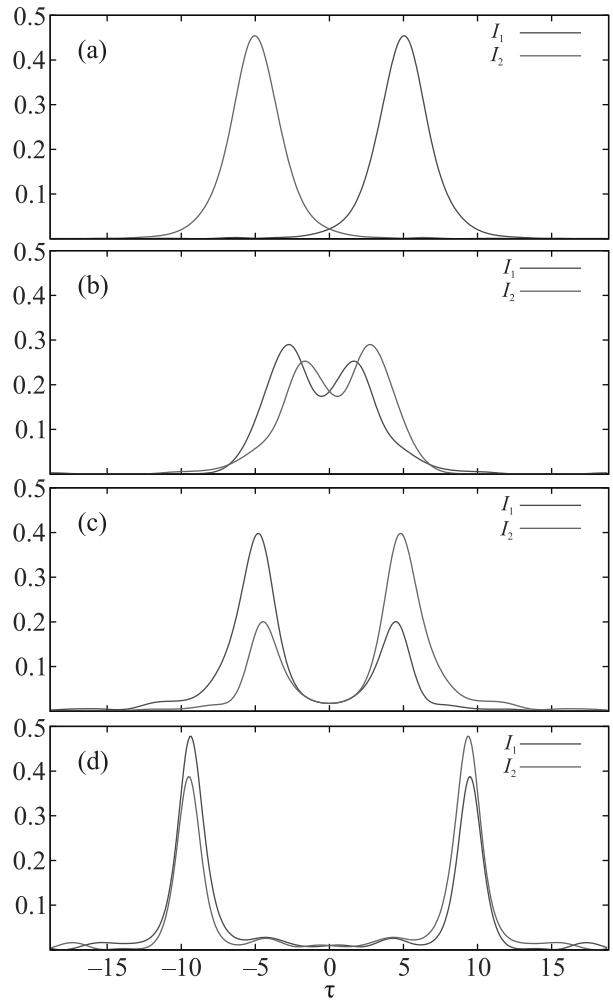


Рис. 2. (Цветной онлайн) Лобовое столкновение ( $R = 0$ ) световых пучей при относительной скорости их сближения  $v = 0.1$ . Показаны обе интенсивности при  $x = y = 0$  на дистанциях распространения: (а) –  $\zeta = 20$ ; (б) –  $\zeta = 60$ ; (с) –  $\zeta = 80$ ; (д) –  $\zeta = 140$

Зато самые коренные различия были замечены в других процессах, а именно, при столкновениях двух солитонов (напомним, что центр каждого из них движется по классической траектории, так что они могут тесно сблизиться на некотором интервале переменной  $\zeta$ ). Столкновения солитонов с противоположными круговыми поляризациями происходят существенно иначе, нежели столкновения между одинаково поляризованными солитонами. Так, если сближаются примерно равные по числам  $N_1$ ,  $N_2$  левый и правый солитоны, то первый “видит” для себя во втором незаполненную глубокую потенциальную яму. Естественно, первая “жидкость” стремится “перетечь” в эту вторую яму. При перетекании она передает во вторую яму также часть своего импуль-

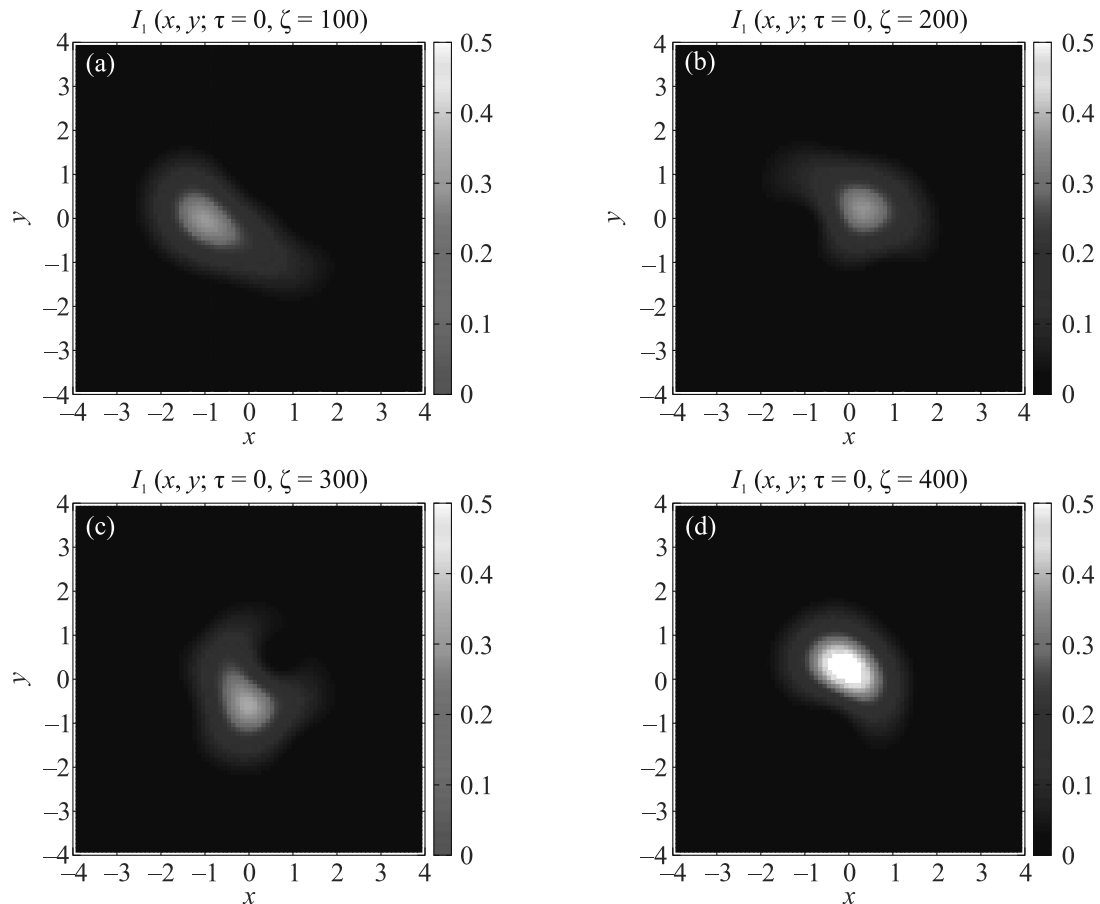


Рис. 3. (Цветной онлайн) “Слипшиеся” после касательного столкновения при  $R = 1.2$ ,  $v = 0.1$  солитоны. Показана интенсивность  $I_1(x, y)$  в поперечной плоскости  $\tau = 0$  на нескольких дистанциях распространения. В этой же плоскости интенсивность  $I_2(x, y) = I_1(-x, -y)$  в силу симметрии начальных условий

са. Соответственно, вторая жидкость перетекает в первую яму, а формы обеих ям изменяются. Что получится в конечном итоге, зависит от относительной скорости продольного сближения  $v$  и от “прицельного параметра” – радиуса  $R$ , если говорить о строго винтовых орбитах солитонов в осесимметричном потенциале. Таким образом, даже в самом минимальном “наборе” имеем четыре “входных” параметра:  $N_1$ ,  $N_2$ ,  $v$  и  $R$ . На то, чтобы “пройти” по четырехмерной параметрической области достаточно подробно, понадобится значительное компьютерное время. Пока что более-менее систематически были промоделированы только столкновения с  $N_1 = N_2 = 5.7$  (нелинейность уже не слабая, но солитон еще устойчив; начальные значения  $a^2 = b^2 = 0.9$ ,  $c^2 = 5.0$  близки к равновесным). Параметр  $v = \{0.1, 0.2, 0.3\}$ , а радиус  $R$  брался от 0.0 до 1.4 с шагом 0.2. Некоторые характерные результаты представлены на рис. 2–4. Так, на рисунке 2 показаны последовательные стадии лобового столкновения двух противоположно поляризо-

ванных по кругу солитонов, в результате которого образовались две бинарные световые пули. На рисунке 3 представлен случай  $R = 1.2$ ,  $v = 0.1$ , когда касательное столкновение привело к “слипанию” двух солитонов в более сложную вращающуюся неосесимметричную структуру. Наконец, рисунок 4 (где  $R = 1.0$ ,  $v = 0.1$ ) демонстрирует столкновение с почти полным отражением, при котором каждый солитон поменял направление своего движения на обратное, получив при этом лишь малую порцию другой компоненты. Этот пример отличается от представленного на рис. 2; там каждый солитон в основном продолжил свое движение в прежнем направлении. Надо еще сказать, что в некоторых случаях после столкновения получались солитоны с примерно равными долями обеих компонент (например, при  $R = 0.4$ ,  $v = 0.1$ , не показано).

Довольно часто, особенно после вторичных столкновений вблизи границы вычислительной области, происходил волновой коллапс (например,

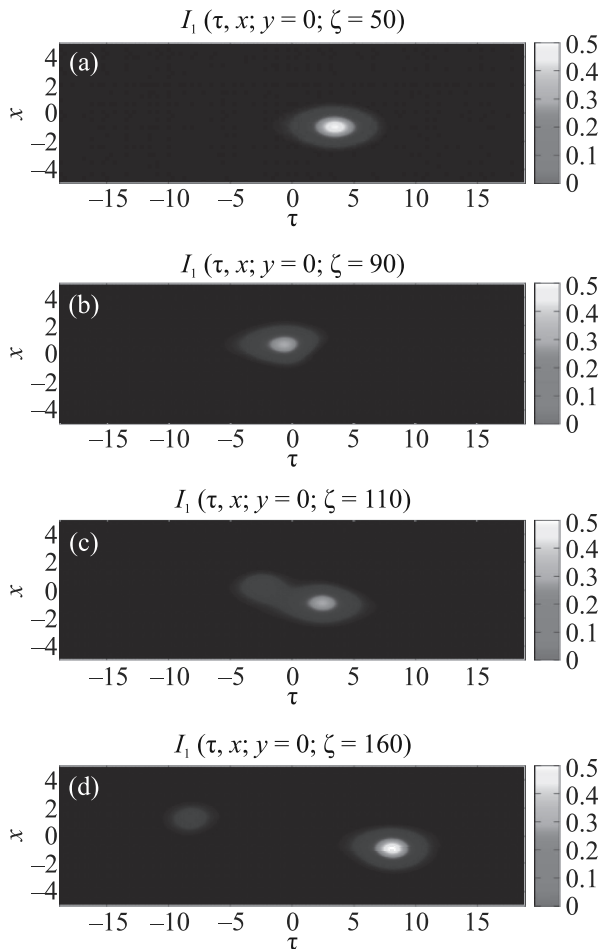


Рис. 4. (Цветной онлайн) Касательное столкновение при  $R = 1.0$ ,  $v = 0.1$ , в результате которого образовались два бинарных солитона. Показана интенсивность  $I_1(\tau, x)$  в плоскости  $y = 0$  на нескольких дистанциях распространения. В этой же плоскости  $I_2(\tau, x) = I_1(-\tau, -x)$  по симметрии начальных условий. До и после столкновения световые пучи движутся по винтовым линиям; поэтому были выбраны такие значения координаты  $\zeta$ , при которых центры солитонов близки к пересечению плоскости  $y = 0$

при  $R = 0.2$ ,  $v = 0.1$ , не показано). Были проведены еще несколько численных экспериментов с “тяжелыми” солитонами при  $N_1 = N_2 = 8.0$ . У таких солитонов запас устойчивости невелик, и поэтому столкновения приводили к коллапсу практически во всех случаях, за исключением достаточно больших  $R \gtrsim 1.4$ . Мы здесь не будем останавливаться на обсуждении этого явления.

Во всех представленных примерах скорость сближения была малой, и поэтому процессы столкновения получались довольно затянутыми и сильно неупругими. Если столкнуть две быстрых световых пучей, то их взаимодействие будет квази-упругим.

Для сравнения были также промоделированы столкновения между одинаково поляризованными по кругу солитонами. И в каждом случае наблюдались качественные различия с приведенными выше примерами, причем развитие событий сильно зависело от начальной разности фаз между однокомпонентными солитонами. Например, при лобовом столкновении, подобном представленному на рис. 2, при нулевой разности фаз немедленно происходил коллапс, в противофазе солитоны отталкивались, не приходя в тесное сближение, а при разности фаз  $\pi/2$  “световая жидкость” перетекала от одного солитона к другому (эти результаты не показаны). Взаимодействие же между противоположными круговыми поляризациями от фазы вообще не зависит.

**Закключение.** Таким образом, в этой работе впервые учтено взаимодействие между двумя поляризациями света при теоретическом рассмотрении трехмерных солитонов в многомодовых градиентных волноводах с керровской нелинейностью. Показана возможность существования двухкомпонентных световых пучей. При численном моделировании столкновений между противоположно поляризованными по кругу световыми пучьями наблюдается интересная и разнообразная нелинейная динамика, кардинально отличная от столкновений между одинаково поляризованными солитонами. Богатству и сложности возможных сценариев развития событий при рассеянии солитонов способствует большее число внутренних степеней свободы, которые возбуждаются в двухкомпонентной системе и взаимодействуют с трансляционным движением (аналогично одномерному случаю [24–26]). Пока что сделаны лишь несколько первых шагов на пути исследования подобных бинарных структур. Несомненно, данное направление имеет широкие перспективы, в том числе экспериментальные, так как однокомпонентные солитоны в рассматриваемых системах уже реализованы в лаборатории [5].

**Финансирование работы.** Работа выполнена в рамках госзадания по теме FFWR-2024-0013.

**Конфликт интересов.** Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

1. Y. Silberberg, *Opt. Lett.* **15**, 1282 (1990).
2. S.-S. Yu, C.-H. Chien, Y. Lai, and J. Wang, *Opt. Commun.* **119**, 167 (1995).
3. S. Raghavan and G. P. Agrawal, *Opt. Commun.* **180**, 377 (2000).
4. B. A. Malomed, D. Mihalache, F. Wise, and L. Torner, *J. Opt. B* **7**, R53 (2005).

5. W.H. Renninger and F.W. Wise, *Nat. Commun.* **4**, 1719 (2013).
6. F. Eilenberger, K. Prater, S. Minardi, R. Geiss, U. Röpke, J. Kobelke, K. Schuster, H. Bartelt, S. Nolte, A. Tünnermann, and T. Pertsch, *Phys. Rev. X* **3**, 041031 (2013).
7. B. A. Malomed, *Multidimensional Solitons*, AIP Publishing (online), Melville, N. Y. (2022); <https://doi.org/10.1063/9780735425118>.
8. O. V. Shtyrina, M. P. Fedoruk, Y. S. Kivshar, and S. K. Turitsyn, *Phys. Rev. A* **97**, 013841 (2018).
9. P. Parra-Rivas, Y. Sun, and S. Wabnitz, *Opt. Commun.* **546**, 129749 (2023).
10. L. Berge, *Phys. Rep.* **303**, 259 (1998).
11. В. Е. Захаров, Е. А. Кузнецов, *Успехи физических наук* **182**, 569 (2012).
12. D. E. Edmundson and R. H. Enns, *Phys. Rev. A* **51**, 2491 (1995).
13. V. Skarka, V. I. Berezhiani, and R. Miklaszewski, *Phys. Rev. E* **56**, 1080 (1997).
14. D. Mihalache, D. Mazilu, L.-C. Crasovan, B. A. Malomed, and F. Lederer, *Phys. Rev. E* **61**, 7142 (2000).
15. D. Mihalache, D. Mazilu, I. Towers, B. A. Malomed, and F. Lederer, *Phys. Rev. E* **67**, 056608 (2003).
16. D. Mihalache, D. Mazilu, F. Lederer, B. A. Malomed, Y. V. Kartashov, L.-C. Crasovan, and L. Torner, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 023902 (2005).
17. A. B. Aceves, O. V. Shtyrina, A. M. Rubenchik, M. P. Fedoruk, and S. K. Turitsyn, *Phys. Rev. A* **91**, 033810 (2015).
18. S. K. Adhikari, *Phys. Rev. E* **94**, 032217 (2016).
19. А. А. Балакин, В. А. Миронов, С. А. Скобелев, *ЖЭТФ* **151**, 59 (2017).
20. C. Milian, Y. V. Kartashov, and L. Torner, *Phys. Rev. Lett.* **123**, 133902 (2019).
21. Т. Майтееваруноо, В. А. Маломед, and D. V. Skryabin, *J. Opt.* **23**, 015501 (2021).
22. Е. Д. Залозная, А. Е. Дормидонов, В. О. Компанец, С. В. Чекалин, В. П. Кандидов, *Письма в ЖЭТФ* **113**, 817 (2021).
23. А. Л. Берхоер, В. Е. Захаров, *ЖЭТФ* **58**, 903 (1970).
24. Y. Tan and J. Yang, *Phys. Rev. E* **64**, 056616 (2001).
25. R. H. Goodman and R. Haberman, *Phys. Rev. E* **71**, 056605 (2005).
26. R. H. Goodman and R. Haberman, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 104103 (2007).
27. В. П. Рубан, *Письма в ЖЭТФ* **117**, 292 (2023).
28. J. J. Garcia-Ripoll, V. M. Perez-Garcia, and V. Vekslerchik, *Phys. Rev. E* **64**, 056602 (2001).
29. V. M. Perez-Garcia, H. Michinel, J. I. Cirac, M. Lewenstein, and P. Zoller, *Phys. Rev. A* **56**, 1424 (1997).
30. J. J. Garcia-Ripoll, V. M. Perez-Garcia, and P. Torres, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1715 (1999).
31. C. Mas Arabi, A. Kudlinski, A. Mussot, and M. Conforti, *Phys. Rev. A* **97**, 023803 (2018).



# Оптическая спиновая инициализация азот-вакансионных центров в изотопно-обогащенном ( $^{28}\text{Si}$ ) кристалле 6H-SiC для квантовых технологий

Ф. Ф. Мурзаханов<sup>+1)</sup>, М. А. Садовникова<sup>+</sup>, Г. В. Мамин<sup>+</sup>, Д. В. Шуртакова<sup>+</sup>, Е. Н. Мохов\*, О. П. Казарова\*, М. Р. Гафуров<sup>+</sup>

<sup>+</sup>Институт физики, Казанский (Приволжский) федеральный университет, 420008 Казань, Россия

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

Поступила в редакцию 1 марта 2024 г.

После переработки 13 марта 2024 г.

Принята к публикации 13 марта 2024 г.

Высокоспиновые дефектные центры в кристаллических матрицах используются в качестве базы для квантово-вычислительных технологий, высокочувствительных сенсоров и источников однофотонных излучений. В данной работе методами фотоиндуцированного ( $\lambda = 980$  нм) высокочастотного (94 ГГц, 3.4 Тл) импульсного электронного парамагнитного резонанса при температуре  $T = 150$  К исследованы оптически активные азот-вакансионные центры окраски ( $\text{NV}^-$ ) в изотопно-модифицированном ( $^{28}\text{Si}$ , ядерный спин  $I = 0$ ) кристалле карбида кремния 6H- $^{28}\text{SiC}$ . Идентифицированы три структурно-неэквивалентных типа  $\text{NV}^-$  центров с аксиальной симметрией и определены их спектроскопические параметры. Длинные ансамблевые значения времен спин-решеточной  $T_1 = 1.3$  мс и спин-спиновой  $T_2 = 59$  мкс релаксаций  $\text{NV}^-$  центров со сверхузкими линиями поглощения (450 кГц), позволяют высокоселективно возбуждать резонансные переходы между подуровнями ( $m_l$ ), обусловленными слабым сверхтонким взаимодействием ( $A \approx 1$  МГц) с ядрами  $^{14}\text{N}$  ( $I = 1$ ), для квантового манипулирования электронной спиновой намагниченностью.

DOI: 10.31857/S1234567824080032, EDN: JGWBUQ

Собственные или искусственно наведенные точечные дефекты в различных материалах привлекают к себе особое внимание исследователей, поскольку даже при крайне малых концентрациях могут оказывать существенное влияние на различные физико-химические характеристики веществ. Ряд дефектов вакансионного типа (центры окраски) способствует изменению оптических свойств кристаллов в видимом и ближнем инфракрасном (ИК) диапазонах [1–4]. Наличие высокоспинового состояния (электронный спин  $S \geq 1$ ) в сочетании с оптическими, зарядовыми и когерентными свойствами, позволяет рассматривать центры окраски в качестве кандидатов на роль квантового бита (кубита) – базовой вычислительной единицы квантового компьютера. Широко известным и изученным является азот-вакансионный ( $\text{NV}^-$ ) центр в алмазе, на основе которого реализованы прототипы квантово-вычислительных устройств и симуляторов, базовые протоколы квантовой криптографии и сенсоры, чувствительные к малым изменениям темпера-

туры [1, 2], магнитных полей [3] и давления [4]. Однако дороговизна производства и низкая технологичность алмазной матрицы затрудняют масштабное интегрирование алмаза в существующую полупроводниковую технику. Карбид кремния (SiC), содержащий центры окраски, призван стать возможной альтернативой алмазу, поскольку лишен обозначенных недостатков последнего и обладает достаточной механической прочностью, температурной, химической и радиационной стойкостью [5]. Известно, что SiC может служить надежной матрицей для широкого спектра высокоспиновых ( $S = 1$  и  $S = 3/2$ ) дефектов, таких как вакансии кремния ( $\text{V}_{\text{Si}}$ ), дивакансии ( $\text{VV}$ ) [6] и отрицательно заряженные азот-вакансионные центры ( $\text{NV}^-$ ), являющиеся, с точки зрения микроскопической структуры, прямыми “близнецами”  $\text{NV}^-$  центров в алмазе [7, 8]. Спектр люминесценции  $\text{NV}^-$  центров в SiC с длиной волны  $\lambda = 1.1$ – $1.25$  мкм (ближний ИК диапазон) попадает в окно прозрачности биологических тканей и оптоволоконных каналов передачи информации (Одиапазон), существенно расширяя границы их практического применения.

<sup>1)</sup>e-mail: murzakhanov.fadis@yandex.ru

Высокоспиновые центры в молекулярных соединениях и кристаллах в зависимости от локальной симметрии характеризуются параметрами расщепления спиновых подуровней в нулевом магнитном поле (*zero-field splitting*)  $D$  и  $E$ , определяемые спин-спиновым и спин-орбитальными вкладами. Снятие спинового вырождения между состояниями с  $M_S = 0$  и  $M_S = \pm 1$  позволяет рассматривать центр окраски в качестве кубита. Наличие у центров окраски ( $NV^-$  и  $VV$ ) в SiC спин-зависимого канала рекомбинации (со спонтанным излучением в ИК диапазоне) в цикле оптического возбуждения приводит к преимущественному заселению состояния с  $M_S = 0$ . Данный эффект лежит в основе обнаружения сигнала от одиночного центра методом оптического детектирования магнитного резонанса (ОДМР) и создания чувствительных наноразмерных сенсоров с высоким пространственным разрешением [9].

В данной работе представлены результаты, полученные методом фотоиндуцированной спектроскопии электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) в  $W$ -диапазоне (94 ГГц) с высоким спектральным разрешением и с использованием различных импульсных последовательностей для идентификации  $NV^-$  центров, установления времен релаксации поперечной и продольной электронной намагниченностей  $NV^-$  центров в изотопно-обогащенном кристалле  $6H-^{28}SiC$ .

Объемные кристаллы  $6H-^{28}SiC$ , обогащенные немагнитным изотопом кремния  $^{28}Si$  ( $I = 0$ ), были выращены методом высокотемпературной сублимации из газовой фазы (PVT, англ., physical vapor transport) с использованием прекурсора, обогащенного изотопом  $^{28}Si$  до  $\approx 99\%$  [10]. Оценка концентрации изотопа  $^{29}Si$  ( $I = 1/2$ ) в выращенных образцах, проведенная методом ЭПР [11], выявила содержание этого изотопа на уровне 1%, что соответствует снижению его концентрации в четыре раза относительно природной распространенности (4.67%). Концентрация примеси азота составляла величину  $C \approx 10^{17} \text{ см}^{-3}$ . Далее кристаллы  $6H-^{28}SiC$  облучались электронами с энергией 2 МэВ и дозой  $4 \times 10^{18} \text{ см}^{-2}$  с целью создания вакансионных дефектов. Для создания стабильных азот-вакансионных центров, облученные кристаллы отжигались в атмосфере аргона в течение 2 ч при температуре  $T = 900^\circ\text{C}$ , оптимальной для образования  $NV^-$  центров [12]. Для исследования  $NV^-$  центров методом ЭПР из кристаллов были вырезаны образцы размером  $450 \times 450 \times 670$  мкм.

Импульсные спектры ЭПР детектировались при температуре кристалла  $T = 150 \text{ K}$  на коммерче-

ском спектрометре Bruker Elexsys E680 (Карлсруэ, ФРГ), оснащенным гелиевым продувным криостатом и сверхпроводящим магнитом для создания магнитной индукции на образце вплоть до значений  $B_0 = 6 \text{ Тл}$ , с использованием последовательности Хана ( $\pi/2 - \tau - \pi$ ) с длительностью микроволнового (сверхвысокочастотного, СВЧ) импульса  $\pi/2 = 40 \text{ нс}$  и временем задержки между импульсами  $\tau = 1.2 \text{ мкс}$ . Регистрировалась интегральная интенсивность электронного спинового эха (ЭСЭ) в зависимости от величины  $B_0$ . Спады поперечной намагниченности получены детектированием ЭСЭ при фиксированном на одном из спиновых переходов значении  $B_0$  и изменении временного интервала  $\tau$ . Время продольной (спин-решеточной) релаксации получено с помощью последовательности "инверсия-восстановления" ( $\pi - T_d - \pi/2 - \tau - \pi$ ) при изменении времени  $T_d$  между инвертирующим импульсом и детектирующей последовательностью. Эксперименты по фотоиндуцированному ЭПР были осуществлены с использованием непрерывного твердотельного лазера с длиной волны  $\lambda = 980 \text{ нм}$  и выходной мощностью до 500 мВт. Симуляция спектров ЭПР проведена с помощью программного пакета Matlab – EasySpin 5.2.0 [13].

В отсутствие оптического возбуждения (темновой режим) сигнал ЭПР не регистрируется (рис. 1, темно-фиолетовая кривая на вставке внизу). Фотоиндуцированный спектр ЭПР при параллельной ориентации кристалла относительно направления внешнего магнитного поля ( $c \parallel B_0$ ) состоит из двух компонент с расщеплением приблизительно равным 93 мТл (рис. 1, зеленая линия). Наблюдаемый триплетный вид спектра связан с наличием расщепления спиновых уровней в нулевом магнитном поле, характеризуемой величиной  $D$  (тонкая структура). Спектр ЭПР состоит из нескольких вкладов, обусловленных наличием трех разных позиций атомов углерода и кремния в кристаллической решетке  $6H-^{28}SiC$ , отличающихся локальным окружением вторых координационных сфер. Таким образом, методом ЭПР можно зарегистрировать сигналы от трех структурно-неэквивалентных  $NV^-$  центров ( $N_{k1}V_{k2}$ ,  $N_hV_h$ ,  $N_{k2}V_{k1}$ , рис. 1, зеленая линия на вставке внизу) с различными спектроскопическими характеристиками, представленными в табл. 1. Предварительная идентификация центров окраски была произведена на основе ранее полученных результатов в  $X$ -диапазоне стационарными методами ЭПР [14]. Величина  $D$  для каждого центра окраски отличается благодаря чувствительности к локальному окружению и соответствующему распределению электронной плотности. Воздействие на иссле-

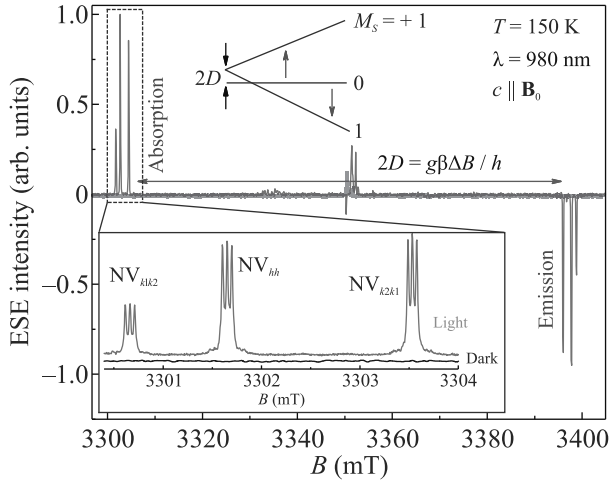


Рис. 1. (Цветной онлайн) Фотоиндуцированный спектр ЭПР  $NV^-$  центров (зеленая линия) в кристалле  $6H-^{28}SiC$  в ориентации  $c||B_0$  (вверху). Указана величина расщепления тонкой структуры  $2D$ . Спектр ЭПР в темновом режиме при выключенном лазере показан темно-фиолетовым цветом. На вставке сверху схематично показаны уровни энергии центра окраски с изменением  $B_0$ . Внизу представлен детальный спектр ЭПР низкополевой компоненты тонкой структуры с соотносением групп линий к трем различным азот-вакансионным центрам

**Таблица 1.** Величины спинового гамильтониана трех аксиальных  $NV^-$  центров в  $6H-^{28}SiC$

Дефект	$g_{\perp}$	$g_{\parallel}$	$D$ (МГц)
$NV_{k1k2}$	2.0037 (3)	2.0045 (3)	1358 (2)
$NV_{hh}$	2.0035 (3)	2.0045 (3)	1331 (2)
$NV_{k2k1}$	2.0036 (3)	2.0045 (3)	1282 (2)

дурый кристалл источником оптического излучения с  $\lambda = 980$  нм приводит к нерезонансному возбуждению (3A, орбитальный синглет  $\rightarrow$  3E, орбитальный дублет) всех трех аксиальных  $NV^-$  центров с симметрией  $C_{3v}$ . При этом особенностью фотоиндуцированного спектра ЭПР является наличие сигнала как поглощения (низкополевая компонента), так и излучения (высокополевая компонента), т.е. сигналы инвертированы по фазе друг относительно друга. Данный эффект вызван интеркомбинационной конверсией при переходе центра с метастабильного возбужденного орбитального состояния (1A) в основное приводящему к преимущественному заселению немагнитного состояния с  $M_S = 0$ , и, как следствие, к многократному усилению сигнала ЭПР. Приложение сильного внешнего магнитного поля ( $B_0 \approx 3.4$  Тл), с доминирующим вкладом зеемановского взаимодействия (94 ГГц) над расщеплением в нулевом магнитном поле ( $2D \approx 2.6$  ГГц для ориентации кристалла

$c||B_0$ ), в отличие от техник ОДМР или ЭПР в классическом X-диапазоне (9.4 ГГц), способствует образованию вырожденного триплетного спинового состояния с “чистыми” волновыми функциями, без их перемешивания с соседними уровнями.

С учетом симметрии точечного дефекта и величины электронного спина, для описания полученных результатов использовался следующий спиновый гамильтониан:

$$H = g\mu_B \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} + D(S_z^2 - 2/3) + E(S_x^2 - S_y^2) + A_{\parallel} S_z I_z + A_{\perp} (S_x I_x + S_y I_y) + P(I_z^2 - 2/3), \quad (1)$$

где  $g$  – фактор спектроскопического расщепления,  $\beta$  – магнетон бора,  $D$  и  $E$  – величины тонкой структуры,  $S_{x,y,z}$  и  $I_{x,y,z}$  – проекции электронного и ядерного спина;  $A$  и  $P$  – величины сверхтонкого и квадрупольного взаимодействий.

Члены спинового гамильтониана (1) представлены в порядке убывания по величине вклада, при этом последние три слагаемых относятся к электрон-ядерному взаимодействию, возникающему благодаря наличию магнитного изотопа азота  $^{14}N$  с ядерным спином  $I = 1$  ( $n = 2I + 1 = 3$ ). Данное взаимодействие в спектре ЭПР проявляется в виде образования дополнительной сверхтонкой структуры с расщеплением порядка  $A \approx 1$  МГц (рис. 1, нижняя вставка). Детальное изучение сверхтонкого и квадрупольного взаимодействий требует дополнительных исследований, что выходит за рамки данной научной работы.

Стоит отдельно отметить крайне узкие линии ЭПР шириной на полувысоте всего 450 кГц, что говорит о высоком качестве кристалла и малом разбросе величин  $g$  и  $D$ . Известно, что величина  $D$  крайне чувствительна к локальным деформациям [15], кластерным образованиям [16] и наличию иных примесных центров [17] в кристаллической решетке. Также, во время роста кристалла SiC наблюдается побочный эффект образования локальных кристаллических структур и политипных модификаций, отличающихся от основной матрицы, что также приводит к изменению величины  $D$  [18]. Если в величине расщепления в нулевом магнитном поле спин-спиновый вклад является доминирующим, то небольшое распределение межатомных расстояний скажется на разбросе данной величины и, как итог, приведет к дополнительному неоднородному асимметричному уширению и искажению структурных линий [15]. Для исследованного кристалла, несмотря на дефектную природу центра окраски с преимущественной спин-спиновой природой расщепления в нулевом магнитном поле (что следует из расчетов ме-

тодом теории функционала плотности [14, 19]), разброс величины  $D$  не зарегистрирован.

При повороте кристалла от параллельной ( $0^\circ, c \parallel B_0$ ) к перпендикулярной ( $90^\circ, c \perp B_0$ ) канонической ориентации относительно  $B_0$ , величина расщепления в нулевом магнитном поле (46.5 мТл) уменьшилась ровно в 2 раза (рис. 2). Это соответ-

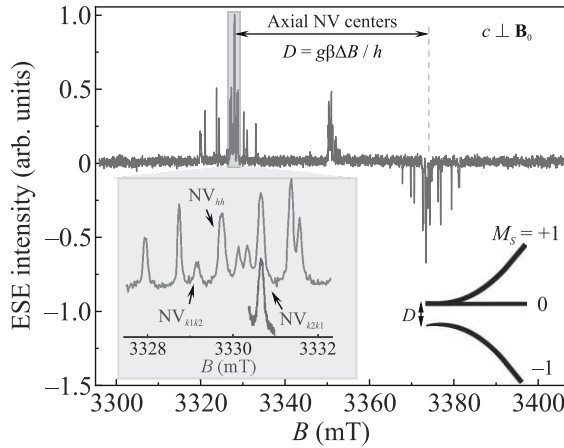


Рис. 2. (Цветной онлайн) Спектр ЭПР при  $c \perp B_0$ . Снизу слева показан подробный спектр низкополевых компонент тонкой структуры (кривая красного цвета – регистрация с меньшим шагом по  $B_0$ ). Справа снизу схематично показаны уровни энергии  $NV^-$  центра при  $c \perp B_0$

ствует угловой зависимости расщепления линий, описываемой как  $\Delta B(\theta) = D(3 \cos^2(\theta) - 1)$ , для аксиального типа симметрии дефекта ( $C_{3v}$ ) без ромбического искажения ( $E = 0$ ). С помощью моделирования положения резонансных переходов для каждого  $NV^-$  центра были определены основные спектроскопические величины спинового гамильтониана, показанные в табл. 1. Стоит отметить, что в перпендикулярной ориентации обнаружение аксиальных  $NV^-$  центров является затруднительной задачей из-за перекрытия с линиями поглощений от базальных  $NV^-$  центров с более низкой симметрией ( $C_{1h}$ ). Как видно на вставке рис. 2, при  $c \perp B_0$  линии от сверхтонкой структуры ( $m_I$ ) перестают быть разрешенными, образуя широкую и бесструктурную линию без возможности селективного возбуждения.

С помощью стандартных импульсных последовательностей были определены времена спин-спиновой и спин-решеточной релаксации при  $T = 150$  К (рис. 3). Данная температура ранее была установлена в качестве оптимальной для наблюдения фотоактивных дефектов со спиновым выстраиванием при оптическом возбуждении (532 нм) в кристалле

политипов  $4H-SiC$  и  $6H-Si^{13}C$  [6, 7]. Отметим, что запись кривых релаксаций проводилась при непрерывном лазерном возбуждении с малой мощностью (125 мВт), чтобы источник оптического излучения не приводил к дополнительному разрушению когерентности  $NV^-$  центров. Время поперечной релаксации намагниченности  $NV^-$  центра составляет порядка 60 мкс, что больше, чем для ранее исследованных центров окраски ( $NV^- T_2 = 49$  мкс и  $VV T_2 = 40$  мкс) для  $4H-SiC$  даже при более низких гелиевых температурах ( $T = 7$  К) [7] и в 4 раза длиннее, чем для дивакансий ( $T_2 = 15$  мкс) в кристалле  $6H-Si^{13}C$  [6]. Предполагается, что основным механизмом, ответственным за поперечную релаксацию, является спин-спиновое взаимодействие между  $NV^-$  центрами. Величина  $g$ -фактора для  $NV^-$  центров имеет близкое к свободному электрону ( $g_e = 2.0023$ ) значение, указывая на незначительный вклад спин-орбитальной связи и отсутствие его влияния на когерентные свойства [20]. При этом на рис. 3б видно, что в перпендикулярной ориентации время  $T_2$  аксиальных  $NV^-$  центров уменьшилось более чем в 15 раз и составило всего  $T_2 = 3.8$  мкс. Релаксация (восстановление) продольной намагниченности центра окраски вызвана спин-решеточным взаимодействием и равна  $T_1 = 1.3$  мс для  $c \parallel B_0$  и  $T_1 = 0.2$  мс для  $c \perp B_0$ . Существенная разница во временах релаксации между двумя каноническими ориентациями может быть вызвана спектральной (спиновой) диффузией из-за наличия при  $c \perp B_0$  перекрывающихся с базальными центрами резонансных линий. В случае  $T_2$  дополнительный перенос (перераспределение) энергии в спиновой системе для неоднородно уширенных линий (рис. 2) происходит между структурно-неэквивалентными центрами, находящихся в одинаковых условиях близких к резонансным. Время  $T_1$  также подвержено влиянию спиновой диффузии посредством кросс-релаксационных процессов с переходами  $\Delta M_S = \pm 1$  и  $m_I = \pm 1$ , возникающих при взаимодействии спиновых пакетов с малыми константами электрон-ядерных связей ( $A, P \ll \nu_N$ , где  $\nu_N$  – ларморовская частота ядер  $^{14}N$ ). Поскольку время продольной релаксации превышает время поперечной более чем на один порядок, спин-решеточное взаимодействие не является дополнительным источником потери фазовой когерентности центра окраски. Механизмы спин-решеточной релаксаций (Орбаха-Аминова, одно и двух фононные рамановские и “прямые” процессы) требуют детального исследования, а именно, теоретических расчетов и проведения экспериментов в широком температурном диапазоне. При анализе динамических характеристик дефекта, зависимость времен релакса-

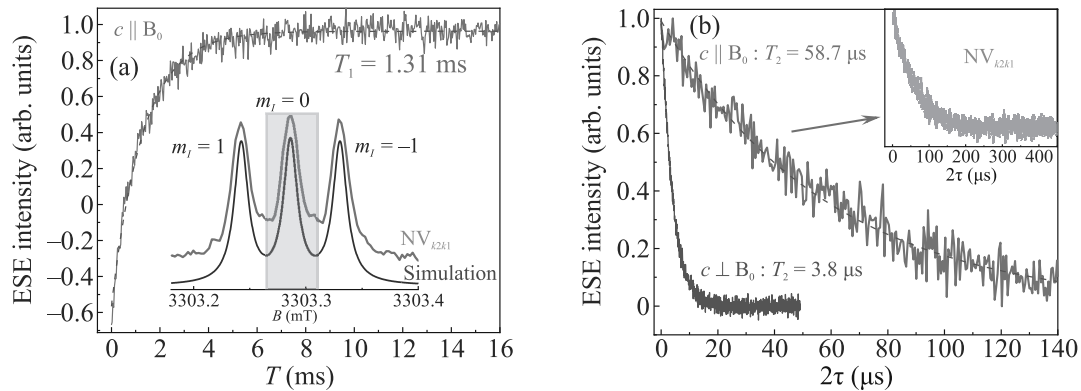


Рис. 3. (Цветной онлайн) Кривые восстановления продольной (а) и спада поперечной (б) намагниченностей  $NV^-$  центра в  $6H-^{28}SiC$ , описанные одноэкспоненциальной функцией (штриховые красные линии) с параметрами, приведенными на рисунке и в тексте работы. На вставке для рис. 3а показан спектр ЭПР  $NV^-$  центра в позиции  $k_2k_1$  вместе с симуляцией, где прямоугольником отмечена область возбуждения и селективного детектирования

ций от позиции  $NV^-$  центра в пределах погрешности не наблюдалась. Таким образом, на рис. 3 показаны результаты для одного типа, как наиболее интенсивного по спектру поглощения,  $NV^-$  центра. В связи с отсутствием спектра ЭПР в темновом режиме релаксационные исследования  $NV^-$  центров без непрерывного оптического возбуждения не были осуществлены. Учитывая, что подобного рода измерения были реализованы для образцов политипа  $4H-SiC$  при  $T = 7\text{ K}$  [7], можно ожидать, что при существенном понижении температуры регистрация ЭСЭ станет возможной и в темновом режиме.

Стоит отметить, что время продольной релаксации  $NV^-$  центра позволяет провести эксперименты по детектированию сигналов методом двойного электрон-ядерного резонанса с использованием радиочастотных (РЧ) и СВЧ-импульсов, например, в последовательности Мимса ( $\pi_{MW}/2 - \pi_{RF} - \pi_{MW}/2 - \tau - \pi_{MW}/2 - \tau - \text{ЭСЭ}$ ) [7, 8]. В данном случае, для наблюдения стимулированного электронного эха можно будет “развести” СВЧ-импульсы вплоть до 1–1.5 мс без существенной потери отношения сигнала к шуму ( $S/N$ ). При этом между импульсами могут быть приложены несколько РЧ-импульсов длиной до 100 мкс для осуществления дополнительной манипуляции ядерными спинами и изучения электрон-ядерных взаимодействий.

Таким образом, благодаря высокой спектральной разрешающей способности высокочастотного ЭПР и уменьшению влияния электрон-ядерных взаимодействий, обусловленных магнитными ядрами кремния, произведена идентификация трех структурно-неэквивалентных азот-вакансионных центров (электронный спин  $S = 1$ ) строго аксиальной симметрии ( $C_{3v}$ ) с установлением для каждого дефекта вели-

чин расщепления в нулевом магнитном поле ( $D$ ). Показано, что нерезонансное оптическое возбуждение ( $3A \rightarrow 3E$ ) с  $\lambda = 980\text{ нм}$  приводит к эффективному спиновому выстраиванию основного состояния  $NV^-$  центров. Узкие линии сигнала ЭПР для ансамблевой системы предоставляют возможность высокоселективных возбуждений центров окраски с реализацией интерфейса “фотон–спин” для создания элементов квантовой сенсорики. Длинные времена электронной релаксации  $NV^-$  центров ( $T_2 = 59\text{ мкс}$  и  $T_1 = 1.3\text{ мс}$  при  $T = 150\text{ K}$ ) потенциально позволяют реализовать различные квантовые алгоритмы с использованием оптических, СВЧ и радиочастотных (много)импульсных воздействий. Полученные результаты по оптической инициализации и считыванию состояний  $NV^-$  центров с помощью микроволновых импульсных последовательностей открывают новые возможности использования высокоспиновых фотоактивных центров в широкозонных полупроводниковых кристаллах  $6H-^{28}SiC$  в квантовых технологиях.

**Финансирование работы.** Работа была поддержана грантом Российского научного фонда # 24-22-00448.

**Конфликт интересов.** Авторы заявляют, что у них нет известных конкурирующих финансовых интересов или личных отношений, которые могли бы повлиять на работу, представленную в этой статье.

1. V. M. Acosta, E. Bauch, M. P. Ledbetter, A. Waxman, L.-S. Bouchard, and D. Budker, Phys. Rev. Lett. **104**, 070801 (2010); <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.070801>.
2. C. E. Bradley, J. Randall, M. H. Abobeih, R. C. Berrevoets, M. J. Degen, M. A. Bakker, M. Markham, D. J. Twitchen, and T. H. Taminiau,

- Phys. Rev. X **9**, 031045 (2019);  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevX.9.031045>.
3. J. F. Barry, J. M. Schloss, E. Bauch, M. J. Turner, C. A. Hart, L. M. Pham, and R. L. Walsworth, *Rev. Mod. Phys.* **92**, 015004 (2020);  
<https://doi.org/10.1103/RevModPhys.92.015004>.
  4. M. W. Doherty, V. V. Struzhkin, D. A. Simpson, L. P. McGuinness, Y. Meng, A. Stacey, T. J. Karle, R. J. Hemley, N. B. Manson, L. C. L. Hollenberg, and S. Prawer, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 047601 (2014);  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.112.047601>.
  5. M. Xu, Y. R. Girish, K. P. Rakesh, P. Wu, H. M. Manukumar, S. M. Byrappa, Sh. M. Udayabhanu, and K. Byrappa, *Mater. Today. Commun.* **28**, 102533 (2021); <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2021.102533>.
  6. R. A. Babunts, Yu. A. Uspenskaya, A. P. Bundakova, G. V. Mamin, A. N. Anisimov, and P. G. Baranov, *JETP Lett.* **116**, 785 (2022);  
<https://doi.org/10.1134/S002136402260241X>.
  7. F. F. Murzakhanov, B. V. Yavkin, G. V. Mamin, S. B. Orlinskii, H. J. von Bardeleben, T. Biktagirov, U. Gerstmann, and V. A. Soltamov, *Phys. Rev. B* **103**, 245203 (2021);  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.245203>.
  8. R. A. Babunts, Yu. A. Uspenskaya, A. P. Bundakova, G. V. Mamin, E. N. Mokhov, and P. G. Baranov, *JETP Lett.* **118**, 629 (2023);  
<https://doi.org/10.1134/S0021364023603135>.
  9. P. Neumann, I. Jakobi, F. Dolde, C. Burk, R. Reuter, G. Waldherr, J. Honert, T. Wolf, A. Brunner, J. H. Shim, D. Suter, H. Sumiya, J. Isoya, and J. Wrachtrup, *Nano Lett.* **13**, 2738 (2013);  
<https://doi.org/10.1021/nl401216y>.
  10. Yu. A. Vodakov, E. N. Mokhov, M. G. Ramm, and A. D. Roenkov, *Krist. Tech.* **14**, 729 (1979);  
<https://doi.org/10.1002/crat.19790140618>.
  11. V. A. Soltamov, C. Kasper, A. V. Poshakinskiy, A. N. Anisimov, E. N. Mokhov, A. Sperlich, S. A. Tarasenko, P. G. Baranov, G. V. Astakhov, and V. Dyakonov, *Nat. Commun.* **10**, 1678 (2019);  
<https://doi.org/10.1038/s41467-019-09429-x>.
  12. H. J. von Bardeleben, J. L. Cantin, A. Csore, A. Gali, E. Rauls, and U. Gerstmann, *Phys. Rev. B* **94**, 121202 (2016); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.121202>.
  13. S. Stoll and A. Schweiger, *J. Magn. Reson.* **178**, 42 (2006); <https://doi.org/10.1016/j.jmr.2005.08.013>.
  14. Kh. Khazen, H. J. von Bardeleben, S. A. Zargaleh, J. L. Cantin, M. Zhao, W. Gao, T. Biktagirov, and U. Gerstmann, *Phys. Rev. B* **100**, 205202 (2019);  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.100.205202>.
  15. P. Udvarhelyi, V. O. Shkolnikov, A. Gali, G. Burkard, and A. Palyi, *Phys. Rev. B* **98**, 075201 (2018);  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.075201>.
  16. P. J. M. van Kan, E. van der Horst, E. J. Reijerse, P. J. M. van Bentum, and W. R. Hagen, *J. Chem. Soc., Faraday Trans.* **94**, 2975 (1998);  
<https://doi.org/10.1039/A803058H>.
  17. K. Park, M. A. Novotny, N. S. Dalal, S. Hill, and P. A. Rikvold, *Phys. Rev. B* **65**, 014426 (2001);  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.65.014426>.
  18. И. Елисеев, Е. Единач, О. Казарова, А. Смирнов, *ФТТ* **65**(6), 1031 (2023);  
<https://doi.org/10.21883/FTT.2023.06.55661.74>.
  19. J. Davidsson, V. Ivady, R. Armiento, T. Ohshima, N. T. Son, A. Gali, and I. A. Abrikosov, *Appl. Phys. Lett.* **114**, 112107 (2019);  
<https://doi.org/10.1063/1.5083031>.
  20. M. J. Graham, J. M. Zadrozny, M. Shiddiq, J. S. Anderson, M. S. Fataftah, S. Hill, and D. E. Freedman, *J. Am. Chem. Soc.* **136**, 7623 (2014); <https://doi.org/10.1021/ja5037397>.

# Формирование О-образной структуры в красном крыле частотно-углового спектра при филаментации на протяженной атмосферной трассе

Д. В. Пушкарев<sup>+\*1)</sup>, Л. В. Селезнев<sup>+</sup>, Г. Э. Ризаев<sup>+</sup>, Д. С. Урюпина<sup>\*</sup>, Н. А. Жидовцев<sup>\*</sup>, О. Г. Косарева<sup>++</sup>,  
А. Б. Савельев<sup>++\*</sup>

<sup>+</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

<sup>\*</sup>Физический факультет, МГУ имени М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 21 марта 2024 г.

После переработки 21 марта 2024 г.

Принята к публикации 22 марта 2024 г.

Экспериментально наблюдалась О-образная структура на длинах волн 930–960 нм в частотно-угловом спектре суперконтинуума, сгенерированного при филаментации фемтосекундного лазерного импульса с центральной длиной волны 740 нм на 75-метровой трассе в воздухе. Появление данной особенности частотно-углового спектра обусловлено наличием полосы поглощения водяных паров в диапазоне 930–960 нм и связанной с этим поглощением области аномальной дисперсии. Данный результат открывает перспективы для удаленного одноимпульсного детектирования примесей, содержащихся в воздухе.

DOI: 10.31857/S1234567824080044, EDN: KMBAQC

**1. Введение.** Филаментация фемтосекундного лазерного излучения в воздухе сопровождается формированием широкополосного когерентного излучения – суперконтинуума [1, 2]. При филаментации импульсов в ближнем инфракрасном (ИК) диапазоне он простирается от ультрафиолетового до среднего ИК [3, 4]. Столь широкий спектр и возможность его удаленного получения на заданном расстоянии от источника открывают перспективы применения фемтосекундных филаментов в задачах дистанционного зондирования [5]. В связи с этим важную роль приобретает исследование частотно-угловой структуры излучения, создаваемого при филаментации на протяженной атмосферной трассе, и эволюция этой структуры в процессе распространения.

К настоящему моменту экспериментально и в численном моделировании исследованы основные черты этой эволюции. Показано, что на оси пучка после филаментации в красном крыле спектра формируется последовательность максимумов, появление которых вызвано самомодуляцией на мгновенном и задержанном отклике среды [6, 7]. По мере распространения импульса данные максимумы испытывают сдвиг в сторону больших длин волн [8, 9], причем в коллимированной геометрии преобразование красного крыла спектра с увеличением сдвига

максимумов в ИК продолжается вплоть до расстояний порядка двух десятков метров за область плазмы [10]. В синем крыле спектра излучение суперконтинуума представлено как приосевой компонентой, так и компонентами, распространяющимися под углом к оси филамента, образующими коническую эмиссию [7, 11]. Зависимость углового распределения излучения суперконтинуума, формируемого при филаментации, от длины волны, обуславливает необходимость совместного исследования спектральных и угловых его характеристик.

Для этой цели была разработана методика измерения частотно-угловых спектров излучения после филаментации [12]. Частотно-угловой  $((\theta, \omega)$  или  $(\theta, \lambda)$  спектр представляет собой двумерное распределение интенсивности, на котором по одной из осей отложена частота  $\omega$  (либо длина волны  $\lambda$ ) излучения, а по другой – угол  $\theta$  к оси пучка, под которым эта частота (длина волны) распространяется. Данный метод представляет собой мощное средство для анализа процессов, происходящих при филаментации, так как объединяет спектральные и пространственные характеристики излучения в одном измерении. Частотно-угловые спектры содержат косвенную информацию о временной структуре импульса при филаментации [12], а также – о дисперсионных свойствах среды, в которой распространяется импульс [13–15]. Так, при нормальной дисперсии среды

<sup>1)</sup>e-mail: d-push@yandex.ru

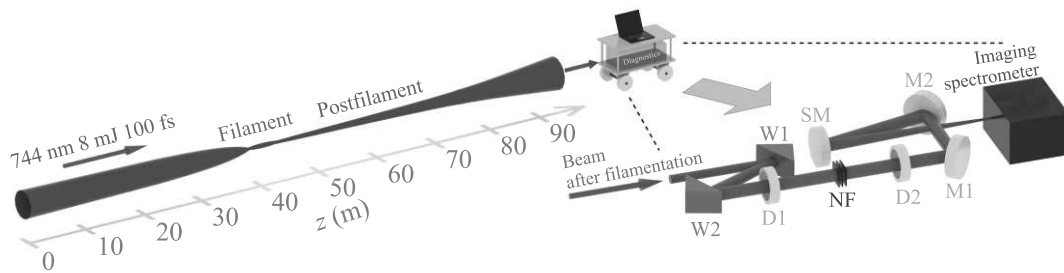


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема эксперимента: W1 и W2 – кварцевые клины; D1, D2 – юстировочные диафрагмы; NF – нейтральные светофильтры; M1, M2 – плоские зеркала с алюминиевым напылением; SM – сферическое зеркало с алюминиевым напылением

частотно-угловой спектр приобретает форму буквы X, а при аномальной дисперсии – буквы O [13, 14]. Переход между этими двумя характерными формами при изменении центральной длины волны лазерного импульса был экспериментально продемонстрирован в конденсированных средах [14, 16]. В экспериментах, проводимых в воздухе, наблюдалась X-образная форма частотно-углового спектра [4, 17–20] (в некоторых случаях – с отсутствующими “ветвями” в красном крыле, что характерно для дисперсии, близкой к нулевой [16]).

В недавней работе [21] в численном счете была показана возможность плавного переход от X-образной формы частотно-углового спектра к его O-образной форме при фиксированной центральной длине волны лазерного импульса за счет изменения состава газовой смеси, в которой происходит филаментация. Расчет выполнен для смеси азота под давлением 40 бар и водяного пара под давлением до 0.36 бар при температуре 85 °C для центральной длины волны лазерного импульса 1.3 мкм. Появление области отрицательной дисперсии, необходимой для формирования O-образной структуры частотно-углового спектра, обусловлено наличием полосы поглощения паров воды в районе 1.3 мкм.

В настоящем исследовании мы впервые экспериментально зарегистрировали формирование O-образной структуры в частотно-угловом спектре импульса после филаментации в атмосферном воздухе на протяженной трассе. При этом, в отличие от условий, предложенных в работе [21], нами не применялась никакая специальная модификация среды для наблюдения этой структуры. Длина волны лазерного источника также не подбиралась для попадания в полосу поглощения: спектральные компоненты в районе этой полосы генерировались в процессе филаментации. Диапазон длин волн 930–960 нм, в котором наблюдалась O-образная структура частотно-углового спектра, соответствует на 2 порядка более слабому поглощению паров воды по сравнению с полосой по-

глощения на 1.3 мкм. Совокупность этих факторов делает полученный результат интересным не только с фундаментальной точки зрения, но и в контексте задач диагностики примесей, содержащихся в атмосфере.

**2. Схема эксперимента.** Схематичное изображение эксперимента представлено на рис. 1. Излучение лазерной системы на титан-сапфире, генерирующей импульсы с центральной длиной волны 744 нм, энергией 8.5 мДж, длительностью 100 фс с частотой повторения 10 Гц, выводилось на протяженную трассу в коридоре. Диаметр пучка составлял 8 мм по уровню 1/e. Длина трассы, на которой можно было проводить измерения, достигала 95 м. Филамент формировался на расстоянии  $\leq 40$  м от выхода из лазерной системы, после чего на дистанции еще около 40 м диаметр центрального пятна, сформированного в филаменте, слабо изменялся по мере распространения, что характерно для режима постфиламентации [22] (см. также статьи [10, 20], в которых подробно рассматривалась эволюция постфиламентационного канала в близких экспериментальных условиях).

Для измерения  $(\theta, \lambda)$ -спектров был собран передвижной экспериментальный стенд, позволяющий осуществлять их одноимпульсную регистрацию в спектральном окне шириной 250 нм. Перестраивая спектрометр по длине волны с помощью поворота решетки, мы зарегистрировали частотно-угловые спектры в диапазоне от 650 до 1020 нм (в нескольких импульсах). Чтобы исключить влияние хроматических aberrаций при перестройке в столь широком спектральном диапазоне, для формирования углового спектра в плоскости входной щели спектрометра мы применили сферическое зеркало SM с алюминиевым напылением (вместо обычно используемой для этой цели линзы). Нелинейное распространение импульса прерывалось с помощью кварцевого клина W1. Затем энергия импульса дополнительно уменьшалась с помощью кварцевого клина W2.



С помощью этих клиньев и пары юстировочных диафрагм D1 и D2 обеспечивалось постоянство угла ввода излучения в спектрометр при перемещении экспериментального стенда вдоль трассы. Калиброванные нейтральные светофильтры NF использовались для дополнительного ослабления. Пара зеркал M1 и M2 позволяла минимизировать угол падения излучения на сферическое зеркало SM и, соответственно, вносимый астигматизм. Для регистрации спектров применялся изображающий спектрометр Solar M150i-III с ПЗС TheImagingSource DMK 33GX249. При обработке спектров учитывались квантовый выход ПЗС в зависимости от длины волны, кривая отражения дифракционной решетки спектрометра и кривые пропускания калиброванных нейтральных светофильтров.

**3. Результаты эксперимента.** На рисунке 2 представлены полученные в эксперименте  $(\theta, \lambda)$ -спектры исходного импульса (рис. 2a), импульса сразу после филамента (40 м от лазерной системы, рис. 2b) и на расстоянии 75 м от лазерной системы (рис. 2c).

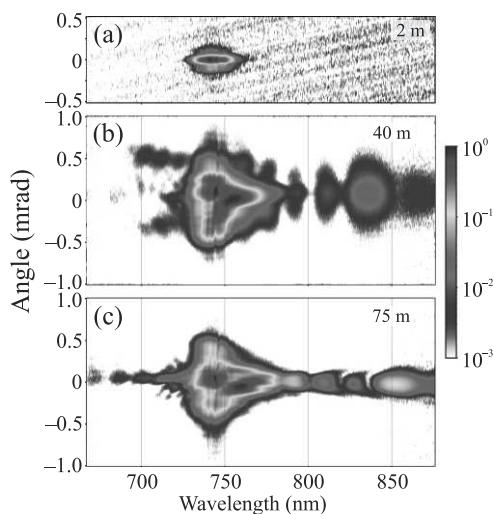


Рис. 2. (Цветной онлайн)  $(\theta, \lambda)$ -спектры импульса: (a) – на выходе из лазерной системы; (b) – на расстоянии 40 м от лазерной системы ( $\sim 5$  м за филаментом); (c) – на расстоянии 75 м от лазерной системы ( $\sim 40$  м за филаментом). Каждый из спектров нормирован на свой максимум

Если исходный лазерный импульс был коллимирован (расходимость около 0.1 мрад) и имел относительно небольшую ширину спектра (порядка 10 нм по полувысоте), то уже на расстоянии 40 м от лазерной системы его спектральные и угловые характеристики радикальным образом меняются. Формируется коническая эмиссия в антистоксовой обла-

сти с расходимостью порядка 0.5 мрад относительно оси. Коническая эмиссия может служить указанием на появление плазмы (см. [11]). В стоксовом крыле спектра возникает последовательность локальных максимумов на оси, протянувшаяся далее 850 нм.  $(\theta, \lambda)$ -спектр на этом расстоянии уже обладает всеми характерными чертами, возникающими при филаментации фемтосекундного лазерного импульса в воздухе.

На расстоянии 75 м интенсивность всех локальных максимумов в ИК-области увеличивается, их угловая ширина несколько уменьшается вследствие формирования постфиламента, а наиболее выраженный из них смещается на длину волны, превышающую 850 нм (рис. 2b).

Коническая эмиссия в стоксовой части спектра перестает регистрироваться, так как выходит за пределы апертур оптических элементов, используемых для ввода излучения в спектрометр.

В целом, измеренные  $(\theta, \lambda)$ -спектры находятся в хорошем согласии с полученными ранее данными для случая филаментации в воздухе [17, 18, 20] и имеют X-форму, соответствующую нормальной дисперсии воздуха в этом спектральном диапазоне.

Рассмотрим теперь частотно-угловую структуру более длинноволновой части спектра на 780–1010 нм (см. рис. 3). Для ее измерения мы повернули решетку спектрометра таким образом, чтобы интенсивное излучение на центральной длине волны не попадало на ПЗС, что позволило регистрировать менее интенсивные спектральные компоненты.

Локальные максимумы в длинноволновой области  $(\theta, \lambda)$ -спектра, зарегистрированные практически сразу после их появления на расстоянии 40 м от лазерной системы, имеют унимодальную форму (рис. 3a). Однако на расстоянии 75 м от лазерной системы форма ИК локальных максимумов меняется. В диапазоне 900–970 нм  $(\theta, \lambda)$ -спектр имеет вид направленных друг к другу ветвей с минимумом интенсивности в районе 950 нм, т.е. предстает собой O-форму спектра с провалом интенсивности вблизи 950 нм (рис. 3b). На длинах волн меньше 900 нм такое поведение не наблюдается.

Возникновение области аномальной дисперсии вблизи 950 нм, необходимой для формирования O-образной структуры  $(\theta, \lambda)$ -спектра, возможно при наличии вблизи этой области полосы поглощения. Единственным компонентом атмосферного воздуха, обладающим значимым поглощением вблизи 950 нм, является водяной пар. На рисунке 3c показан спектр его поглощения в диапазоне 780–1010 нм, рассчитанный на основе данных из базы HITRAN [23]. Полоса

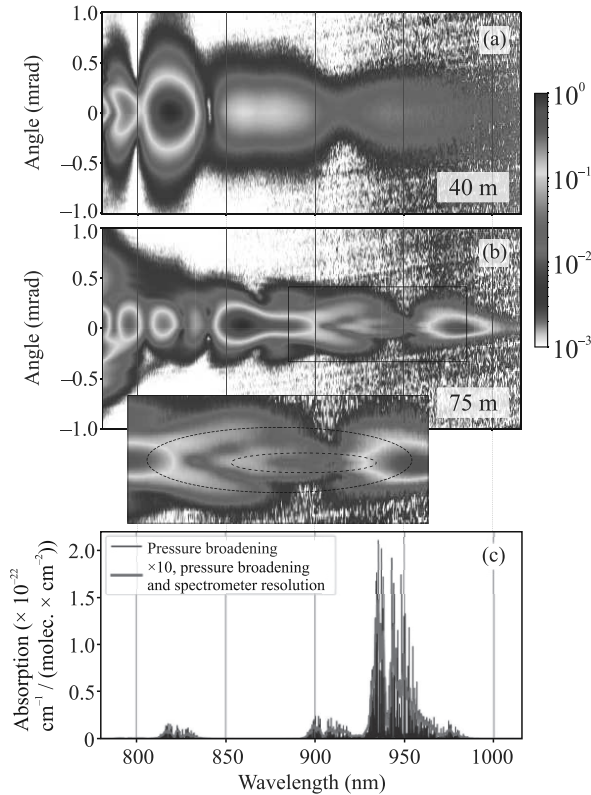


Рис. 3. (Цветной онлайн) (a), (b) –  $(\theta, \lambda)$ -спектры стоксова крыла суперконтинуума после филаментации на расстояниях 40 и 75 м, соответственно, нормированные на свои максимумы. На вставке на рис. (b) в увеличенном масштабе показана область  $(\theta, \lambda)$ -спектра, в которой наблюдается О-образная структура (выделена пунктиром). (c) – Спектр поглощения паров воды по данным HITRAN с учетом столкновительного уширения линий (черная кривая). Тот же спектр с учетом разрешения спектрометра (красная кривая, значения домножены на 10)

поглощения на 930–960 нм соответствует центру наблюдаемой О-образной структуры на  $(\theta, \lambda)$ -спектре.

**4. Обсуждение результатов и выводы.** Таким образом, нами впервые экспериментально зарегистрирована О-образная структура  $(\theta, \lambda)$ -спектра в канале постфиламента фемтосекундного лазерного импульса в воздухе на расстоянии более 50 м от выхода из лазерной системы. В нашем случае появление этой структуры обусловлено областью аномальной дисперсии, связанной с полосой поглощения воды в диапазоне 930–960 нм. Данный результат демонстрирует потенциальную возможность диагностировать примеси, содержащиеся в атмосферном воздухе по влиянию этих примесей на дисперсионные характеристики среды. В отличие от линий поглощения, которые может быть сложно отделить количе-

ственно от модуляций спектра в нелинейной среде, трансформация частотно-углового спектра является качественным изменением, которое легко определить на фоне такой модуляции. Измерения частотно-углового спектра не требуют точной подстройки длины волны лазера и допускают одновременную регистрацию нескольких линий/веществ в одном лазерном импульсе. Отметим, что появление в последнее десятилетие фемтосекундных лазерных систем среднего ИК-диапазона с мощностью, достаточной для формирования филаментов в воздухе [24], открывает широкие возможности для регистрации органических примесей, имеющих полосы поглощения в этом диапазоне.

**Финансирование работы.** Данная работа финансировалась за счет средств бюджета института (учреждения, организации).

Жидовцев Н. А. является стипендиатом фонда развития теоретической физики и математики “БАЗИС”.

**Конфликт интересов.** Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

1. A. Couairon and A. Mysyrowicz, *Phys. Rep.* **441**(2), 47 (2007).
2. V. P. Kandidov, S. A. Shlenov, and O. G. Kosareva, *Quantum Electron.* **39**(3), 205 (2009).
3. J. Kasparian, R. Sauerbrey, D. Mondelain, S. Niedermeier, J. Yu, J.-P. Wolf, Y.-B. André, M. Franco, B. Prade, S. Tzortzakis, A. Mysyrowich, M. Rodriguez, H. Wille, and L. Wöste, *Opt. Lett.* **25**(18), 1397 (2000).
4. F. Théberge, M. Châteauneuf, V. Ross, P. Mathieu, and J. Dubois, *Opt. Lett.* **33**(21), 2515 (2008).
5. P. Qi, W. Qian, L. Guo, J. Xue, N. Zhang, Y. Wang, Z. Zhang, Z. Zhang, L. Lin, C. Sun, L. Zhu, and W. Liu, *Sensors* **22**(18), 7076 (2022).
6. A. Braun, G. Korn, X. Liu, D. Du, J. Squier, and G. Mourou, *Opt. Lett.* **20**(1), 73 (1995).
7. E. T. J. Nibbering, G. Grillon, M. A. Franco, B. S. Prade, and A. Mysyrowicz, *J. Opt. Soc. Am. B* **14**(3), 650 (1997).
8. Y. Chen, F. Théberge, C. Marceau, H. Xu, N. Aközbek, O. Kosareva, and S. L. Chin, *Appl. Phys. B* **91**, 219 (2008).
9. D. Uryupina, N. Panov, M. Kurilova, A. Mazhorova, R. Volkov, S. Gorgutsa, O. Kosareva, and A. Savel'ev, *Appl. Phys. B* **110**, 123 (2012).
10. O. Kosareva, N. Panov, D. Shipilo et al. (Collaboration), *Opt. Lett.* **46**(5), 1125 (2021).
11. O. G. Kosareva, V. P. Kandidov, A. Brodeur, C. Y. Chien, and S. L. Chin, *Opt. Lett.* **22**(17), 1332 (1997).

12. D. Faccio, P. Di Trapani, S. Minardi, A. Bramati, F. Bragheri, C. Liberale, V. Degiorgio, A. Dubietis, and A. Matijosius, *J. Opt. Soc. Am. B* **22**(4), 862 (2005).
13. M. A. Porras and P. Di Trapani, *Phys. Rev. E* **69**(6), 066606 (2004).
14. M. A. Porras, A. Dubietis, E. Kučinskas, F. Bragheri, V. Degiorgio, A. Couairon, D. Faccio, and P. Di Trapani, *Opt. Lett.* **30**(24), 3398 (2005).
15. S. V. Chekalin, E. O. Smetanina, A. I. Spirkov, V. O. Kompanets, and V. P. Kandidov, *Quantum Electron.* **44**(6), 577 (2014).
16. V. P. Kandidov, E. O. Smetanina, A. E. Dormidonov, V. O. Kompanets, and S. V. Chekalin, *JETP* **113**, 422 (2011).
17. D. Faccio, A. Averchi, A. Lotti, P. D. Trapani, A. Couairon, D. Papazoglou, and S. Tzortzakis, *Opt. Express* **16**(3), 1565 (2008).
18. D. E. Shipilo, D. V. Pushkarev, N. A. Panov, D. S. Uryupina, V. A. Andreeva, R. V. Volkov, A. V. Balakin, A. P. Shkurinov, I. Babushkin, U. Morgner, O. G. Kosareva, and A. B. Savel'ev, *Laser Phys. Lett.* **14**(3), 035401 (2017).
19. Y. E. Geints, D. V. Mokrousova, D. V. Pushkarev, G. E. Rizaev, L. V. Seleznev, I. Y. Geints, A. A. Ionin, and A. A. Zemlyanov, *Opt. Laser Technol.* **143**, 107377 (2021).
20. D. Mokrousova, D. Pushkarev, N. Panov, I. Nikolaeva, D. Shipilo, N. Zhidovtsev, G. Rizaev, D. Uryupina, A. Couairon, A. Houard, D. Skryabin, A. Savel'ev, O. Kosareva, L. Seleznev, and A. Ionin, *Photonics* **8**(10), 446 (2021).
21. N. Panov, D. Shipilo, I. Nikolaeva, V. Kompanets, S. Chekalin, and O. Kosareva, *Phys. Rev. A* **103**(2), L021501 (2021).
22. J.-F. Daigle, O. Kosareva, N. Panov, T.-J. Wang, S. Hosseini, S. Yuan, G. Roy, and S. L. Chin, *Opt. Commun.* **284**(14), 3601 (2011).
23. I. E. Gordon, L. S. Rothman, and R. J. Hargreaves et al. (Collaboration), *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **277**, 107949 (2022).
24. A. V. Mitrofanov, A. A. Voronin, D. A. Sidorov-Biryukov, A. Pugžlys, E. A. Stepanov, G. Andriukaitis, T. Flöry, S. Ališauskas, A. B. Fedotov, A. Baltuška, *Sci. Rep.* **5**(1), 8368 (2015).

# Магнетосопротивление и симметрия двумерного электронного газа гетероструктур AlGaN/AlN/GaN<sup>1)</sup>

Н. К. Чумаков<sup>+2)</sup>, А. А. Андреев<sup>+</sup>, И. В. Белов<sup>+</sup>, А. Б. Давыдов\*, И. С. Езубченко<sup>+</sup>, Л. Л. Лев<sup>×</sup>, Л. А. Моргун\*, С. Н. Николаев<sup>+</sup>, И. А. Черных<sup>+</sup>, С. Ю. Шабанов<sup>+</sup>, В. Н. Строков<sup>°</sup>, В. Г. Валеев<sup>+2)</sup>

<sup>+</sup>Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, 123182 Москва, Россия

\*Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

<sup>×</sup>Московский физико-технический институт, 141701 Долгопрудный, Россия

<sup>°</sup>Swiss Light Source, Paul Scherrer Institute, CH-5232 Villigen, Switzerland

Поступила в редакцию 15 декабря 2023 г.

После переработки 1 марта 2024 г.

Принята к публикации 12 марта 2024 г.

Физические свойства двумерного электронного газа, локализованного в слое GaN вблизи интерфейса AlN/GaN гетероструктур AlGaN/AlN/GaN, изучаются не одно десятилетие. По сложившимся представлениям его симметрия совпадает с симметрией несимморфной пространственной группы  $C_{6v}^4$  в объеме GaN. Последнее, однако, неверно. В самом деле, единственный составной элемент этой группы – вращение системы на  $120^\circ$  вокруг оси [0001], направленной по нормали к плоскости интерфейса, с одновременным сдвигом вдоль нее на полпериода кристаллической решетки GaN – для двумерного газа запрещен потенциалом конфайнмента, который, следовательно, понижает его симметрию до симметрии тригональной точечной группы  $C_{3v}$ . Настоящая работа посвящена подтверждению этого факта результатами расчетов из первых принципов методом функционала плотности и данными электрофизических экспериментов.

DOI: 10.31857/S1234567824080056, EDN: KAIEIEB

**1. Введение.** Нитридные транзисторы с высокой подвижностью электронов (HEMT) на основе гетероструктур AlGaN/AlN/GaN получили широкое практическое применение в качестве базовых компонент устройств стабильной высокотемпературной микроволновой электроники высокой мощности. Их уникальные свойства обусловлены наличием в них двумерного электронного газа (2DEG) с концентрацией носителей  $\sim 10^{13}$  см<sup>-2</sup>, локализованного в слое нитрида галлия вблизи границы раздела AlN/GaN, без специального легирования. На этом фоне растет интерес к более глубокому изучению физических свойств этого семейства материалов, мотивируемый потребностью расширения их функциональных возможностей.

Одной из актуальных задач в этой области является описание динамических токовых состояний в таком 2DEG. Ее решение, однако, осложняется тем, что некоторые основные физические свойства этой системы исследованы недостаточно глубоко. В част-

ности, величина и тип тензора эффективных масс 2DEG в гетероструктуре AlGaN/AlN/GaN, знание которых критически необходимо для расчета откликов системы на внешние воздействия, до сих пор служат предметом обсуждения. Господствующим является предположение, что 2DEG локализован достаточно глубоко в толще GaN и “видит” его объемную ( $C_{6v}^4$ ) симметрию, см., например, работу [1] (в частности пункт 2a of Appendix 1, *Model for single-subband 2DEGs*) и библиографию в ней. Ниже будет показано, что эти выводы противоречат результатам недавней работы [2], где 2DEG гетероструктур GaN/AlN HEMT со сверхтонким барьерным слоем был исследован методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) в мягком рентгеновском диапазоне. В этом эксперименте получены первые прямые изображения основных характеристик электронного строения системы в обратном пространстве – поверхности Ферми (ПФ), электронного спектра и заполнения зон, что позволило показать, что форма ПФ электронов 2DEG характеризуется гексагональным искажением с коэффициентом анизотропии порядка 11%, которое трансли-

<sup>1)</sup>См. дополнительный материал к данной статье на сайте нашего журнала [www.jetpletters.ac.ru](http://www.jetpletters.ac.ru)

<sup>2)</sup>e-mail: Chumakov\_NK@nrcki.ru; Valeev\_VG@nrcki.ru

руется в 22%-ную анизотропию эффективной массы его электронов и, в частности, приводит к анизотропии насыщения скорости дрейфа носителей тока в нелинейных транспортных свойствах гетероструктур GaN/AlN/AlGaIn в сильных электрических полях. При этом ARPES, в отличие от косвенных данных электрофизических методик, является практически единственным прямым методом исследования электронной структуры материалов.

Возможная причина этого факта была связана в [2] с релаксацией позиций приинтерфейсных атомов GaN. Однако было отмечено, что предсказанная в расчетах, выполненных без учета спиновой степени свободы электронов, атомная релаксация ограничивается несколькими атомными слоями вблизи границы раздела AlN/GaN, и неясно, почему она должна существенно влиять на электронные свойства 2DEG, максимальная плотность которого локализована на расстоянии  $\sim 3$  нм от этой границы.

Этот и ряд других фактов не находят адекватной интерпретации в предположении о  $C_{6v}^4$  симметрии системы в области локализации 2DEG.

Ранее мы показали, что результаты работы [2] можно объяснить, приняв во внимание то обстоятельство, что наличие в системе конфайнмента 2DEG, порожденного интерфейсом GaN/AlN гетероструктуры, лежащим в плоскости (0001), понижает симметрию 2DEG до симметрии группы  $C_{3v}$  – вращений на  $120^\circ$  вокруг тригональной оси  $c$  (она же [0001]) и зеркального отражения  $x \rightarrow -x$ , где  $x$  – направление оси  $\Gamma\bar{K}$  [3]. Отметим, что из общих соображений подобное утверждение высказывалось и ранее [4]. Простой анализ физической модели [3], основанной на этом наблюдении, показал, что в отсутствие внешнего магнитного поля наблюдаемая в ARPES анизотропия поверхности Ферми 2DEG может быть объяснена членами спин-орбитальной связи (SOC) третьего порядка в  $k$ -гамильтониане  $\hat{H}_n(\mathbf{k})$  (индекс  $n$  здесь нумерует размерно-квантованные состояния электронов в квантовой яме (QWS)), нарушающими вращательную симметрию затравочного гамильтониана  $\hat{H}_0 = \hbar^2 k^2 / 2m^*$ , где  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  и  $m^*$  – эффективная масса электронов в центре зоны Бриллюэна плоскости (0001) в объеме GaN. Действительно, симметрия системы  $C_{3v}$  и инвариантность ее свойств по отношению к обращению времени диктуют следующий выбор эффективного  $2 \times 2$  гамильтониана электронов 2DEG:

$$\hat{H}_n(\mathbf{k}) = E_n + \hat{H}_0 + v_k(k_x \hat{\sigma}_y - k_y \hat{\sigma}_x) + \frac{\lambda}{2}[k_+^3 + k_-^3] \hat{\sigma}_z, \quad (1)$$

где  $E_n$ ,  $n = 0, 1, \dots$  – энергия  $n$ -го QWS (предполагается сепарабельный удерживающий потенциал

$V_c = V_c(z)$ , где ось  $z$  направлена вдоль [0001]),  $k_\pm = k_x \pm ik_y$ ,  $\hat{\sigma}_x$ ,  $\hat{\sigma}_y$  и  $\hat{\sigma}_z$  – стандартные матрицы Паули в спиновом подпространстве,  $v_k = v(1 + \alpha k^2)$ , третье, циркулярно-симметричное слагаемое – спин-орбитальный вклад Рашбы, а член, пропорциональный  $\lambda$  – кубическая по квазиимпульсу добавка Дресельхауса к SOC в  $C_{3v}$ -симметричной системе.

Спектр 2DEG гамильтониана (1) есть  $E_{n\sigma}(\mathbf{k}) = E_n + \hbar^2 k^2 / 2m^* + \sigma \sqrt{v_k^2 k^2 + \lambda^2 k^6 \cos^2(3\theta)}$  где  $E_{n\sigma}(\mathbf{k})$ ,  $\sigma = \pm 1$  – энергия  $\sigma$ -й псевдоспиновой подзоны  $n$ -й QWS,  $\theta$  – азимутальный угол квазиимпульса электрона  $\mathbf{k}$ , отсчитываемый от направления оси  $Ox$ , ориентированной вдоль одного из главных направлений  $\Gamma\bar{K}$ . Заметим, что хотя виду инвариантности свойств системы относительно инверсии времени в отсутствие магнитного поля электронный спектр 2DEG имеет гексагональную симметрию, период его спиновой текстуры в  $k$ -пространстве вдвое больше. Результаты подгонки ПФ к данным ARPES [2], а также вид спиновой текстуры фермиевских электронов для нижней ( $n = 0$ ) QWS, двукратно расщепленной по псевдоспину, приведены на рис. 1.

Отметим, что трехмерный GaN со структурой вюрцита представляет собой нецентросимметричный кристалл, и если бы исследуемый 2DEG наследовал его симметрию ( $C_{6v}^4$ ), вместо (1) для его гамильтониана следовало бы написать (см. в [5] табл. 1):  $\hat{H}_n(\mathbf{k}) = E_n + \hat{H}_0 + a_1(k_x \hat{\sigma}_y - k_y \hat{\sigma}_x) + i \frac{a_2}{2}[k_+^6 - k_-^6] \langle k_z \rangle \hat{\sigma}_z$ , где  $a_1$  и  $a_2$  – константы материала. В отличие от [5], где соответствующая формула записана для трехмерного случая, мы заменили множитель  $k_z$  в последнем слагаемом его средним значением для электрона в размерно-квантованном состоянии. Спектр этого гамильтониана в тех же обозначениях имеет вид  $E_{n\sigma}(\mathbf{k}) = E_n + \hbar^2 k^2 / 2m^* + \sigma \sqrt{a_1^2 k^2 + a_2^2 k^{12} \sin^2(6\theta)}$  и, в отличие от случая симметрии  $C_{3v}$ , описанного выше, отвечает не гексагональному, а додекагональному искажению электронного спектра, что явно противоречит данным ARPES [2]. Как мы увидим ниже, этот вывод согласуется с результатами наших расчетов из первых принципов и с данными электрофизических экспериментов.

**2. Поверхность Ферми: расчет из первых принципов.** Анализ гетероструктур GaN/AlN НЕМТ методом функционала плотности с учетом спина электронов в пакете программ VASP [6–9], v. 5.4.4, который, насколько нам известно, выполнен впервые в настоящей работе, качественно подтверждает эти представления. Расчеты выполнены при  $B = 0$  с использованием PAW-обобщения ультрамягкого псевдопотенциала Вандербиля (US-PP) и метода линеаризованных

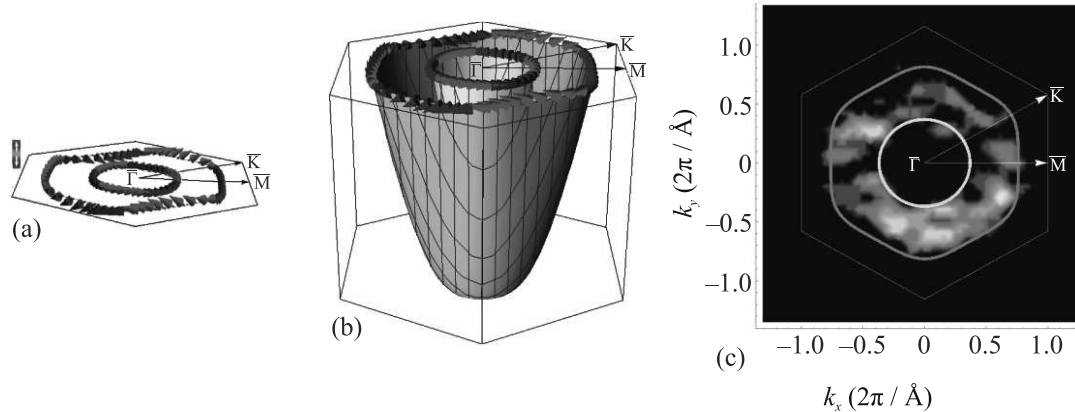


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а), (б) – Поведение спина электронов на поверхности Ферми 2DEG; (с) – результат фитинга поверхности Ферми к данным ARPES [2]

присоединенных плоских волн (LAPW) в параметризации Ceperley-Alder для  $xc$ -потенциала, см. [10–14]. Самосогласованные вычисления проведены с энергией отсечки плоских волн 400 эВ. Исходная структура сверхъячейки из 106 атомов (7 слоев AlN и 19 слоев GaN, пассивированных NH) и вакуумной щели, получена путем релаксации ионных степеней свободы системы, форма и объем сверхъячейки были такими же, как в объемном GaN,  $z$ -координаты атомов фиксировались. Релаксация прекращалась при условии, что абсолютные значения всех сил Хеллмана–Фейнмана на каждом атоме меньше, чем  $EDIFFG = 3 \times 10^{-2}$  эВ/Å. Энергия системы найдена из вариационного принципа, записанного в терминах плотности электронов, при условии, что изменение свободной энергии Гельмгольца между двумя шагами итерации было меньше, чем  $EDIFF = 10^{-6}$  эВ.

На рисунке 2 представлен результат DFT-расчета ПФ нижней (из двух частично заполненных) QWS 2DEG с плотностью электронов  $2.5 \times 10^{13} \text{ см}^{-2}$ , наложенный на данные ARPES [2]. Видно, что

(а) эта подзона размерного квантования двукратно расщеплена по псевдоспину;

(б) обе псевдоспиновые подзоны гексагонально искажены;

(с) фермиевские импульсы в них как функции азимутального угла  $\theta$  меняются в противофазе, что отвечает спектру модельного гамильтониана (1) и было бы невозможно в случае простой параболичности электронного спектра, рассмотренной в [2];

(д) учет кулоновского взаимодействия электронов позволяет получить существенно лучшее соответствие результатов расчета данным ARPES.

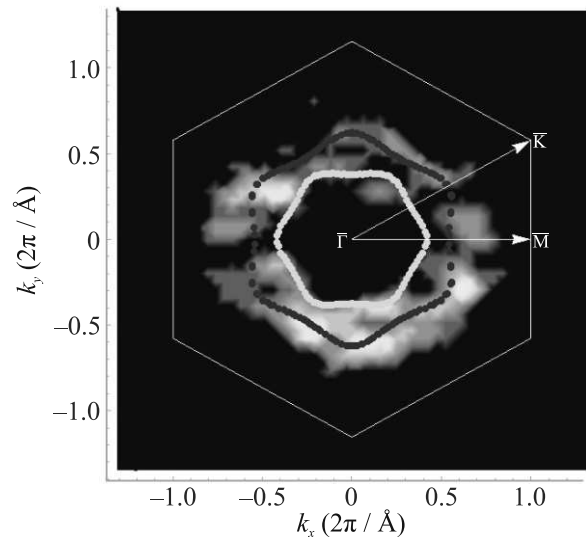


Рис. 2. (Цветной онлайн) Результат DFT-расчета поверхности Ферми 2DEG с электронной плотностью  $2.5 \times 10^{13} \text{ см}^{-2}$ , совмещенный с данными ARPES [2]

Отметим отдельно, что “на вход” VASP получил только химический состав системы и ее исходную структуру в реальном пространстве.

Таким образом, 2DEG нитридных НЕМТ есть двумерный нецентросимметричный металл. Как известно, отсутствие центра инверсии качественно меняет природу блоховских электронов, приводя к наличию нетривиальных геометрических свойств их волновых функций и возникновению сложной спиновой текстуры в обратном пространстве [5] (см. рис. 1б). Нетрудно показать, что во внешнем поперечном магнитном поле спектр 2DEG в модели НВМ теряет гексагональную симметрию – в отличие от электронов в плоскости (0001) объема GaN, симметрия которых, напротив, становится гексагональной.

**3. Образцы.** В настоящей работе изучены некоторые проявления этих свойств в данных магнито-транспортных экспериментов в области поперечных магнитных полей  $B$  до 14 Тл в интервале температур от 3 до 300 К. Для этого на исследуемых гетероструктурах методом лазерной фотолитографии были сформированы модули в виде классического холловского креста и в геометрии ван дер Пау миллиметровых размеров, а также изготовлены образцы в форме окружности, круга и дуги диаметром в 200 микрон с множеством контактов, ориентированных под разными углами относительно кристаллической решетки GaN (см. вставки в рис. 3а и 4а).

**4. Результаты эксперимента и обсуждение.** Магнитотранспортные измерения в геометрии ван дер Пау показали, что как холловское сопротивление  $R_{xy}(1/B)$ , так и величина магнетосопротивления 2DEG  $R_{xx}(1/B)$ , усредненная методом ван дер Пау, демонстрируют осцилляции Шубникова–де-Гааза. Рассчитанная по их периоду плотность электронов  $n_s = 1.5 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$  согласуется с вычисленной по данным о величине постоянной Холла. Однако  $R_{xx}$ , измеряемое на образцах в стандартной геометрии холловского креста, существенным образом зависит от направления протекания тока и имеет вид суперпозиции осциллирующих вкладов, амплитуды и фазы которых также зависят от направления протекания тока. Отметим, что анизотропия магнитолевой зависимости поперечного сопротивления в области осцилляций Шубникова–де-Гааза для двух главных кристаллографических направлений GaN наблюдалась ранее в работе [8], где, однако, вопрос о физическом механизме этого явления не обсуждался.

Удельное магнетосопротивление каждой из дуг  $(\alpha, \beta)$  образца определяется спектром электронов в сильном магнитном поле и зависит как от ширины  $(\alpha - \beta)$  дуги и так и от направления  $(\alpha + \beta)/2$ .

Приведенные на рис. 3 данные получены на образце в форме кольца, данные рис. 4 – на образце в форме дуги.

Анализ данных рис. 3, 4 показывает, что результаты измерений магнетосопротивления для нескольких дуг разной пространственной ориентации с углом раствора в  $120^\circ - (-60^\circ, 60^\circ), (-30^\circ, 90^\circ), (0^\circ, 120^\circ), (30^\circ, 150^\circ)$  – совпадают друг с другом. При этом существенно, что результаты усреднения магнетосопротивления *по любой* дуге с углом раствора в  $120^\circ$  совпадают как между собой (рис. 3а, 4а), так и с результатом усреднения по дуге  $360^\circ$  (рис. 3б), которое фактически реализуется при измерениях магнетосопротивления методом ван дер Пау. В то же время,

для дуг меньшего размера относительное отклонение сопротивления  $\Delta R_{(\alpha, \beta)}(B)/R_p(B)$  от основного хода полевой зависимости сильно зависит от направления протекания тока (рис. 3с, 4б). Причем  $\Delta R_{(\alpha, \beta)}$  для дуг одинаковой ширины, отличающихся ориентацией, в одном и том же магнитном поле может иметь разный знак.

Отметим, что особенности, наблюдаемые на  $\Delta R_{(\alpha, \beta)}(B)$  для дуг малого углового размера  $(\alpha, \beta) < 120^\circ$ , не являются шумами или ошибкой измерений – они воспроизводятся с высокой точностью в разных по времени сканах по магнитному полю, не зависят от направления скана по оси магнитных полей и слабо зависят от температуры (см. рисунки в дополнительных материалах).

Кроме отчетливо наблюдаемых в сильных полях осцилляций Шубникова–де Гааза присутствует вклад в магнетосопротивление от универсальных флуктуаций проводимости, который, более заметен для коротких дуг и уменьшается с ростом длины. Измерение магнетосопротивления на дугах с достаточно большими углами раствора  $(\alpha - \beta)$  позволяет уменьшить вклад фундаментальных флуктуаций.

Следует подчеркнуть, что магнетосопротивление дуг  $120^\circ$  не зависит от ориентации  $(\alpha + \beta)/2$  относительно кристаллографических осей GaN, тогда как зависимости магнетосопротивлений дуг  $90^\circ$ , например, измеряемые методом Ван дер Пау для кольцевого образца с симметричными контактами существенно отличаются. И лишь усреднение по всем четырем измерениям дает совпадение с усреднением по дуге  $120^\circ$  (рис. 3а, б).

Мы полагаем, что наблюдаемая зависимость магнетосопротивления от направления протекания тока относительно кристаллографических осей и особенности  $R_{xx}(\theta, B)$  в области осцилляций Шубникова–де-Гааза обусловлены суперпозицией вкладов двух частично заполненных подзон размерного квантования электронного спектра 2DEG. Каждая из них двукратно расщеплена спин-орбитальной связью, вид которой обусловлен понижением симметрии системы с симметрии несимметричной группы  $C_{6v}^4$  в объеме GaN со структурой вюрцита до тригональной симметрии  $C_{3v}$  вследствие наличия конфинмента 2DEG у интерфейса GaN/AlN. При этом наблюдаемая анизотропия  $R_{xx}(\theta, B)$  определяется особенностями электронной структуры 2DEG.

Итак, поперечное магнетосопротивление 2DEG имеет тригональную симметрию  $C_{3v}$ . И поскольку симметрия 2DEG не может быть выше симметрии любого из его физических свойств и при этом огра-

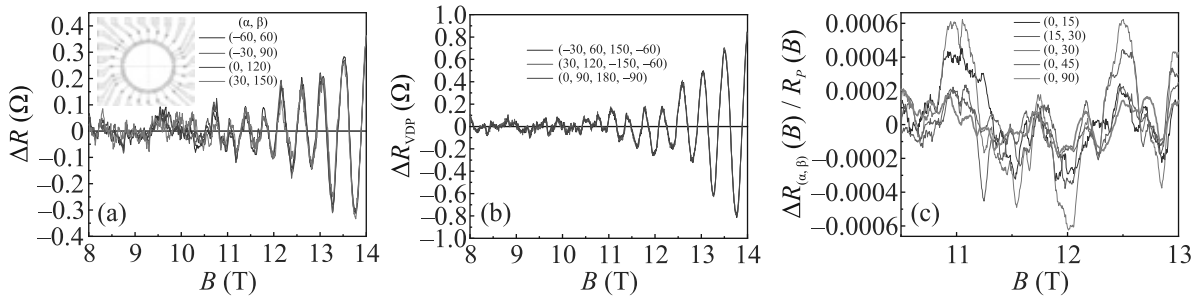


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Магнитопольные зависимости отклонения сопротивления  $\Delta R$  от среднего значения  $R_p(B)$  для дуг  $(\alpha, \beta)$ , по-разному ориентированных относительно кристаллографических осей GaN.  $\Delta R(B) = R(B) - R_p(B)$ , где  $R_p(B)$  – результат аппроксимации зависимости основного хода магнетосопротивления полиномом 5-й степени методом средних квадратов в диапазоне  $8 \div 14$  Тл. (б) – Результаты измерений магнетосопротивления образца методом ван дер Пау для трех четверок контактов  $(-30^\circ, 60^\circ, 150^\circ, -120^\circ)$ ;  $(30^\circ, 120^\circ, -150^\circ, -60^\circ)$ ;  $(0^\circ, 90^\circ, 180^\circ, -90^\circ)$ . (с) – Относительное отклонение  $\Delta R_{(\alpha, \beta)}(B)/R_p(B)$  для дуг  $(\alpha, \beta)$  с разными угловыми размерами  $(\alpha - \beta)$  и ориентациями  $(\alpha + \beta)/2$  относительно кристаллографических осей GaN

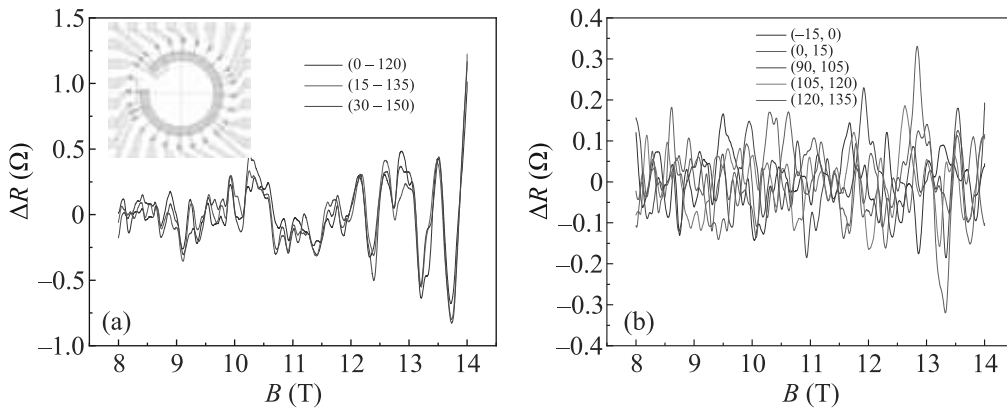


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимости – магнетосопротивления 2DEG за вычетом ее основного хода  $\Delta R_{xx}$  при разных направлениях тока относительно кристаллографических осей для дуг шириной  $120^\circ$  (а) и  $15^\circ$  (б)

ничена снизу симметрией кристаллического поля, такова симметрия и самого исследуемого 2DEG. А это значит, что процессы переноса в нем нельзя корректно описать без учета геометрических свойств его зонной структуры – наличия кривизны Берри, возникновения в  $k$ -пространстве аналога магнитного поля, перенормировки магнитного момента блоховских электронов.

**Финансирование работы.** Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант # 23-29-00536) с использованием оборудования Ресурсного центра Национального исследовательского центра “Курчатовский институт”. Квантовохимические расчеты проведены на ресурсах Федерального центра коллективного пользования научным оборудованием “Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок НИЦ “Курчатовский институт”. Л. Л. Лев благодарит Министерство науки и высшего образования РФ (государственное задание по

Соглашению 075-03-2024-107 от 17.01.2024 г. (проект FSMG-2023-0006)).

**Конфликт интересов.** Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

1. J. Fu, P. H. Penteado, D. R. Candido, G. J. Ferreira, D. P. Pires, E. Bernardes, and J. C. Egues, Phys. Rev. B **101**, 134416 (2020).
2. L. L. Lev, I. O. Maiboroda, M. A. Husanu, E. S. Grichuk, N. K. Chumakov, I. S. Ezubchenko, I. A. Chernykh, X. Wang, B. Tobler, T. Schmitt, M. L. Zanaveskin, V. G. Valeyev, and V. N. Strocov, Nat. Commun. **9**(1), 2653 (2018).
3. N. K. Chumakov, I. S. Ezubchenko, I. A. Chernykh, I. V. Belov, M. L. Zanaveskin, L. L. Lev, V. N. Strocov, and V. G. Valeyev, VIII Euro-Asian Symposium “Trends in MAGnetism” EASTMAG-2022, Book of abstracts, Kazan, Russia (2022), v. II, p. 305.
4. Е. Л. Ивченко, Симметрия в физике твердого тела, [https://solid.phys.spbu.ru/images/Ivch\\_lec\\_asp.pdf](https://solid.phys.spbu.ru/images/Ivch_lec_asp.pdf).



5. K. V. Samokhin, *Ann. Phys.* **324**, 2385 (2009).
6. G. Kresse and J. Hafner, *Phys. Rev. B* **47**, 558 (1993).
7. G. Kresse and J. Furthmuller, *Comput. Mater. Sci.* **6**, 15 (1996)
8. G. Kresse and J. Furthmuller, *Phys. Rev. B* **54**, 11169 (1996).
9. P. E. Blochl, *Phys. Rev. B* **50**, 17953 (1994)
10. D. Hobbs, G. Kresse, and J. Hafner, *Phys. Rev. B* **62**, 11556 (2000).
11. G. Kresse and J. Hafner, *Journ. Phys: Cond. Matt.* **6**, 8245 (1994).
12. O. K. Andersen, *Phys. Rev. B* **12**, 3060 (1975)
13. D. M. Ceperley and B. J. Alder, *Phys. Rev. Letts.* **45**, 566 (1980).
14. L. Yang, J. Wang, T. Wang, M. Wu, P. Wang, D. Wang, X. Yang, F. Xu, W. Ge, X. Wu, X. Wang, and B. Shen, *Appl. Phys. Lett.* **115**(15), 152107 (2019).

# What can we learn from nonequilibrium response of a strange metal?<sup>1)</sup>

B. A. Polyak<sup>+,\*</sup>, V. S. Khrapai<sup>\*</sup>, E. S. Tikhonov<sup>\*,2)</sup>

<sup>+</sup>Moscow Institute of Physics and Technology, 141700 Dolgoprudny, Russia

<sup>\*</sup>Osipyan Institute of Solid State Physics of the Russian Academy of Sciences, 142432 Chernogolovka, Russia

Submitted 15 February 2024

Resubmitted 8 March 2024

Accepted 10 March 2024

DOI: 10.31857/S1234567824080068, EDN: UAYERE

The recent paper by Liyang Chen et al. [1] reports on the measurements of shot noise in heavy fermion strange metal YbRh<sub>2</sub>Si<sub>2</sub> patterned into the nanowire shape. The authors argue that the observed shot noise suppression cannot be attributed to electron-phonon energy relaxation in a standard Fermi liquid model, suggesting a failure of the quasiparticle concept. In the present manuscript we argue that this conclusion is debatable and electron-phonon relaxation plays important role in the experiment.

Figura 1a shows the sketch of the devices studied, made from a 60 nm thick YbRh<sub>2</sub>Si<sub>2</sub> film, with nanowire-shaped constrictions of lengths  $L$  and widths  $w$ , connected to source and drain pads. The pads are covered with 200 nm of gold, which has approximately 10 times higher conductivity than YbRh<sub>2</sub>Si<sub>2</sub> at low temperatures. We assume that the current is redistributed between YbRh<sub>2</sub>Si<sub>2</sub> and gold layers, like it is illustrated in the bottom of Fig. 1a. The region where current redistribution occurs is determined by the current transfer length,  $\lambda$ , which depends on the interface conductance per unit area,  $\sigma_{\text{int}}$ , reflecting the quality of the YbRh<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>/Au interface. The authors provide data for three short devices with  $L \lesssim 1 \mu\text{m}$  and one long device with  $L = 28 \mu\text{m}$  with widths range from 140 nm to 300 nm. We argue that the contribution to the measured resistance and noise may come not only from the nanowires themselves but also from a significant part of the pads and  $\lambda$  may lay in the range of hundreds of micrometers.

We first discuss and analyze the experimental data for the long device. Due to length of constriction, the effect of the interface can likely be neglected. We find that the electron-phonon scattering length in YbRh<sub>2</sub>Si<sub>2</sub> is approximately  $1 \mu\text{m}$  at 3 K and decreases with increas-

ing temperature. This implies that, in the presence of a bias current  $I$ , the electron system in the long constriction can be described by a position-independent electronic temperature  $T_e(I)$ , except for short regions near the pads. We obtain  $T_e(I)$  dependence by extracting  $R = V/I$  from the differential resistance at  $T_0 = 3, 5, \text{ and } 7 \text{ K}$  and using the fact that the temperature dependence of the normalized resistance of the devices is the same as that for the unpatterned film. The curves  $T_e(I)$  we calculated allow one to estimate the electron-phonon coupling, which describes the power flow from the electron to the phonon subsystem in a steady state via  $P_{e-ph} = P_J = \mathcal{V} \Sigma_{e-ph} (T_e^n - T_{ph}^n)$ , where  $P_J$  is the released Joule heat power,  $\mathcal{V}$  is the system volume,  $T_{ph}$  is the phononic temperature and the exponent  $n$  typically varies in the range  $n \approx 3-5$ . The devices are patterned on crystalline germanium substrates ensuring  $T_{ph} = T_0$ . We found that  $n = 4.7$  fits the data perfectly with  $\Sigma_{e-ph} = 9.6 \times 10^8 \text{ W/K}^{4.7} \text{ m}^3$  ( $w = 300 \text{ nm}$ ). From here, we extract the  $T$ -dependence of the electron-phonon scattering length using  $l_{e-ph} = L [\mathcal{L}/n T^{n-2} \mathcal{V} \Sigma_{e-ph} R(T)]^{1/2}$ , where  $\mathcal{L}$  is the Lorenz number. The result is shown in Fig. 1d and in the given temperature range can be reasonably approximated as  $l_{e-ph} \propto T^{-1.7}$  (dashed line). Importantly,  $l_{e-ph}(3 \text{ K}) \approx 1.4 \mu\text{m}$  ensuring the possibility to introduce position-independent electronic temperature  $T_e(I)$  which will be further used in noise treatment.

Before discussing nonequilibrium noise, we note some general details of the noise measurements. In the setup used in [1], see Fig. 1b for the schematic circuit, the voltage noise before amplification is determined by two contributions,  $S_V(I) = \left[ \frac{4k_B T_e(I)}{R_{\text{diff}}(I)} + S_{\text{amp}} \right] R_{\text{diff}}^2(I)$ , where  $R_{\text{diff}} = dV/dI$  is the differential resistance of the device, the first term comes from the current noise of the device itself, the second term is defined by the parasitic input noise of the amplifiers  $S_{\text{amp}}$ , and  $S_V(0)$  is the voltage noise in equilibrium. So, along with deter-

<sup>1)</sup>Supplementary materials are available for this article at DOI: 10.1134/S0021364024600654 and are accessible for authorized users.

<sup>2)</sup>e-mail: tikhonov@issp.ac.ru

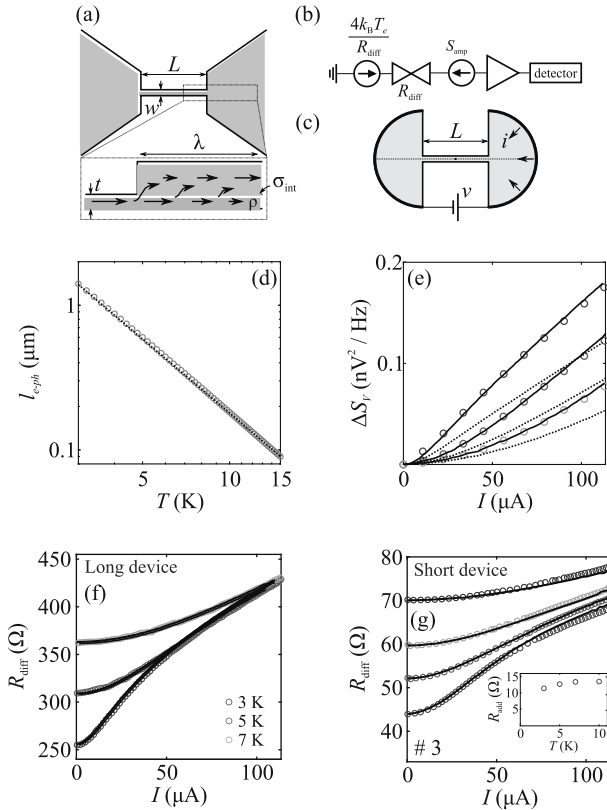


Fig. 1. (Color online) (a) – Schematic representation of a device.  $\text{YbRh}_2\text{Si}_2$  60 nm film (gray) is patterned into a constriction with length  $L$  and width  $w$  connecting two pads covered with 200 nm of gold (yellow). Interface between  $\text{YbRh}_2\text{Si}_2$  and gold is characterized by conductivity  $\sigma_{\text{int}}$ , current transfer length  $\lambda$ . (b) – Equivalent circuit of noise measurement setup. (c) – Geometry used in numerical modelling to calculate the total current through the constriction in response to the applied bias voltage. (d) – Electron-phonon scattering length as a function of temperature. Dashed line is  $l_{e-ph} \propto T^{-1.7}$ . (e) – Excess voltage noise spectral density of the device, as a function of bias current. Symbols represent the data from the experiment [1]. The dotted and dashed lines correspond to with  $S_{\text{amp}} = 0$  and  $S_{\text{amp}} = 5 \cdot 10^{-25} \text{ A}^2/\text{Hz}$ , respectively. Numerical simulation of nonequilibrium response for both: (f) – long and (g) – short (device #3) constrictions. Symbols in panels reproduce the experimental results of [1] for differential resistance as a function of bias current. Solid lines are obtained with numerical simulation

mining the gain it is also important to get the magnitude of amplifier noise. Typically, using homemade voltage amplifier at 4.2 K, its input current noise is on the order of  $10^{-27} \text{ A}^2/\text{Hz}$ . The authors of [1] use room-temperature commercial preamplifiers LI-75 and SR-560 in which one can expect  $S_{\text{amp}} \gtrsim 10^{-25} \text{ A}^2/\text{Hz}$ . We note

that this current noise can not be extracted from the setup calibration [1], because it was performed by detecting the room temperature thermal noise of resistors which is  $1.6 \cdot 10^{-22} \text{ A}^2/\text{Hz}$  for a typical used  $100 \Omega$  and by far exceeds the expected value of  $S_{\text{amp}}$ . At the same time, the current noise of a strange metal long device at 5 K and with a resistance of approximately  $300 \Omega$  is  $9 \cdot 10^{-25} \text{ A}^2/\text{Hz}$  which is comparable to the expected value of  $S_{\text{amp}}$ . By solid lines in Fig. 1e we show the best fits to the experimental data (symbols) of [1] obtained with  $S_{\text{amp}} = 5 \cdot 10^{-25} \text{ A}^2/\text{Hz}$  which perfectly falls in the above order of magnitude expectation.

Numerical simulations are performed in the geometry of Fig. 1c. Here, the radius of pads equals  $20 \mu\text{m}$  and the current redistribution on the lateral scale of these pads is neglected. The electrodes are indicated by thick black lines. This geometry is close to the geometry of the patterned film nearby the constriction in real devices and the scale of  $20 \mu\text{m}$  is large enough to capture the nonlinearity of differential resistance. Fig. 1f, g demonstrates comparison of experimental data for both long and short devices with simulations using  $\Sigma_{e-ph} = 6.1 \cdot 10^8 \text{ W/K}^5 \text{ m}^3$ ,  $n = 5$  and  $\rho(T) = 10.8 + 1.67 T [\mu\Omega \cdot \text{cm}]$ . Note that the difference between thus obtained  $\Sigma_{e-ph}$  and the value extracted from Fig. 1c is due to the slightly different  $n$ . The fit is perfect for the long device, however the fit for the short device is obtained with  $R_{\text{diff}} = dv/di + R_{\text{add}}(T)$ , where  $R_{\text{add}}(T)$  is chosen as current-independent quantity to fit the linear-response resistance for all four temperatures of interest (see inset).

Our findings make the statement on the failure of quasiparticle concept in  $\text{YbRh}_2\text{Si}_2$  arguable and provide information essential for further transport experiments. We thank Liyang Chen and Douglas Natelson for valuable comments on the device fabrication details.

**Funding.** The work is financially supported by Russian Science Foundation Project # 22-12-00342.

**Conflict of interest.** The authors of this work declare that they have no conflicts of interest.

This is an excerpt of the article “What can we learn from nonequilibrium response of a strange metal?”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364024600654

- L. Chen, D.T. Lowder, E. Bakali, A.M. Andrews, W. Schrenk, M. Waas, R. Svagera, G. Eguchi, L. Prochaska, Y. Wang, C. Setty, S. Sur, Q. Si, S. Paschen, and D. Natelson, *Science* **382**, 907 (2023).

# Конические структуры на поверхности жидкости в электрическом поле: влияние объемного и поверхностного зарядов

М. А. Беляев<sup>+</sup>, Н. М. Зубарев<sup>+,\*1)</sup>, О. В. Зубарева<sup>+</sup>

<sup>+</sup>Институт электрофизики Уральского отделения РАН, 620016 Екатеринбург, Россия

<sup>\*</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 4 марта 2024 г.

После переработки 13 марта 2024 г.

Принята к публикации 15 марта 2024 г.

Исследованы конические образования, возникающие на поверхности жидкости с поверхностной ионной проводимостью во внешнем электрическом поле, с учетом влияния объемного электрического заряда потока капель, эмитируемых в окружающий газ с вершины конуса. Получены точные многопараметрические самоподобные решения для распределения электрического поля вблизи вершины острия, а также для движения в этом поле заряженных частиц – ионов и капель. Эти решения позволили найти и классифицировать зависимости между углом жидкого конуса, углом разлета капель, величиной протекающего через конус электрического тока при различных параметрах задачи.

DOI: 10.31857/S123456782408007X, EDN: UDXRDV

**1. Введение.** Как известно [1–7], свободная поверхность жидкости становится неустойчивой при приложении достаточно сильного электрического поля. Взаимодействие поля с индуцированным им электрическим зарядом приводит к взрывному росту возмущений поверхности [8–13], в результате чего на ней могут формироваться стационарные конические структуры [14–17]. Впервые такие структуры были описаны в известной работе Тейлора [18] применительно к случаю идеально проводящей жидкости. Для взаимной компенсации капиллярного и электростатического давлений на поверхности конуса требуется, чтобы напряженность поля  $E$  спадала с расстоянием  $R$  от его вершины по степенному закону  $E \propto R^{-1/2}$ . Действительно, капиллярное давление на поверхности конуса из геометрических соображений всегда удовлетворяет закону  $p_s \propto R^{-1}$ . Для баланса давлений требуется, чтобы электростатическое давление удовлетворяло тому же закону, т.е.  $p_E \propto R^{-1}$ . Поскольку  $p_E \propto E^2$  [19], приходим к тейлоровскому скейлингу  $E \propto R^{-1/2}$ . В [18] было продемонстрировано, что он реализуется для конуса с полууглом раствора  $\beta_T \approx 49.3^\circ$  (угол Тейлора).

Результат Тейлора был обобщен на случай идеальной диэлектрической жидкости Рамосом и Кастельяносом [20]. Было показано, что конические структуры могут возникать на поверхности жидкости с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon$ , превышающей порог  $\varepsilon_c \approx 17.6$ . Кроме того, было установлено, что

полуугол конуса  $\beta$  зависит от  $\varepsilon$  и находится в диапазоне  $0 < \beta < \beta_T$ , т.е. всегда меньше угла Тейлора.

В работе Де Ла Мора [21] было учтено влияние на распределение электрического поля объемного заряда капель, испускаемых с вершины конического острия на поверхности идеально проводящей жидкости. Была определена связь между углом разлета капель и углом конуса. Показано, что угол  $\beta$  зависит от величины электрического тока, протекающего через конус. Как и для непроводящей жидкости,  $\beta$  всегда меньше, чем  $\beta_T$ . Возможность аналитического решения уравнений, описывающих распределение электрического поля и движение в нем заряженных капель, была обусловлена тем, что напряженность поля в области спрея подчиняется тейлоровскому скейлингу  $E \propto R^{-1/2}$ . Это позволило осуществить авторемодельную редукцию соответствующих уравнений и затем точно решить редуцированную задачу.

Далее, в работах Субботина и Семенова [22, 23] рассматривалось коническое образование на поверхности жидкости с ионной проводимостью. Было продемонстрировано, что вблизи вершины конуса поверхностный ток доминирует над током проводимости в объеме жидкости. В этом случае снова может реализовываться скейлинг  $E \propto R^{-1/2}$ , позволяющий решить задачу аналитически (см. также [24, 25]). В частности, анализ решений показал, что конические структуры в этой ситуации могут существовать при диэлектрической проницаемости жидкости  $\varepsilon$ , меньшей  $\varepsilon_c$ .

<sup>1)</sup>e-mail: nick@iep.uran.ru

Указанные выше работы [18, 20–23], учитывающие влияние различных факторов на конические образования, возникающие на поверхности жидкостей в электрическом поле, объединяет реализация одинакового, тейлоровского скейлинга  $E \propto R^{-1/2}$ . В настоящей работе мы продемонстрируем, что весьма многочисленные и сложные нелинейные уравнения, описывающие процессы в жидком конусе, допускают точное аналитическое решение при одновременном учете всех ключевых факторов, рассмотренных в [18, 20–23]. В итоге впервые в рамках единой модели будет описано влияние на геометрию жидкого острья и протекание через него электрического тока (i) объемного заряда эмитируемых с вершины и затем дрейфующих в окружающем газе капель, (ii) поверхностного свободного заряда дрейфующих по границе конуса ионов, а также (iii) поверхностного поляризационного заряда.

Работа построена следующим образом. В разделе 2 выписаны уравнения, описывающие распределение электрического поля с учетом влияния поверхностного заряда дрейфующих по границе конуса ионов и объемного заряда эмитируемых с его вершины капель. В разделе 3 мы найдем точное самоподобное решение задачи, которое позволит определить связи между углом при вершине жидкого острья, углом разлета капель, величиной протекающего через систему электрического тока при различных значениях параметров задачи, таких как диэлектрическая проницаемость жидкости и подвижности носителей заряда. Соответствующие зависимости подробно исследованы в разделе 4, где построена карта возможных режимов и продемонстрировано, что результаты работ [18, 20–23] соответствуют различным асимптотикам предложенной модели.

**2. Исходные уравнения.** Будем полагать, что во внешнем электрическом поле жидкость принимает форму конуса с углом  $2\beta$  при вершине – см. рис. 1. Вершина конуса эмитирует поток заряженных капель в коническую область с углом  $2\gamma$ . Эти капли дрейфуют в окружающем газе.

Выпишем основные уравнения, описывающие распределение электрического поля с учетом влияния объемного и поверхностного электрических зарядов. Естественно использовать сферическую систему координат, где  $R$  – расстояние до вершины конуса, а  $\theta$  – полярный угол. В области спрея  $0 \leq \theta \leq \gamma$  (область 1 на рис. 1) имеется объемный заряд капель плотностью  $\rho$ . В области  $\gamma < \theta < \pi - \beta$  (область 2) заряженные частицы отсутствуют. Считаем также, что объем жидкости  $\pi - \beta \leq \theta \leq \pi$  (область 3) является электронейтральным. На гра-

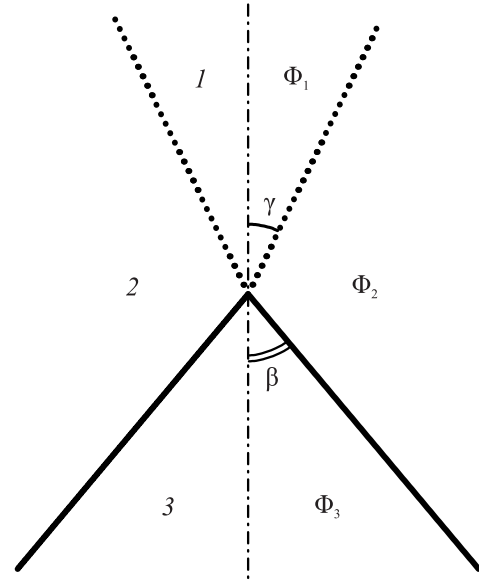


Рис. 1. Схематическое изображение геометрии задачи

нице областей 2 и 3, т.е. на поверхности жидкого конуса  $\theta = \pi - \beta$ , имеется электрический заряд с поверхностной плотностью, являющейся суммой плотностей свободных зарядов (дрейфующих по границе жидкости ионов) и связанных поляризационных зарядов:  $\sigma_{\Sigma} = \sigma + \sigma_p$  (см. также [22]).

Потенциалы электрического поля в областях 1, 2 и 3 обозначим как  $\Phi_{1,2,3}$ . Как и в [21], будем считать, что распределение электрического поля в области спрея является сферически симметричным, т.е.  $\Phi_1 = \Phi_1(R)$  и  $\rho = \rho(R)$ . Оно описывается одномерным уравнением Пуассона

$$\frac{\partial^2 \Phi_1}{\partial R^2} + \frac{2}{R} \frac{\partial \Phi_1}{\partial R} = -\frac{\rho}{\varepsilon_0}, \quad (1)$$

где  $\varepsilon_0$  – электрическая постоянная (диэлектрическую проницаемость окружающего конуса газа считаем равной единице). В электронейтральных областях 2 и 3 потенциалы электрического поля удовлетворяют двумерным уравнениям Лапласа:

$$\frac{\partial^2 \Phi_{2,3}}{\partial R^2} + \frac{2}{R} \frac{\partial \Phi_{2,3}}{\partial R} + \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2 \Phi_{2,3}}{\partial \theta^2} + \frac{\cot \theta}{R^2} \frac{\partial \Phi_{2,3}}{\partial \theta} = 0. \quad (2)$$

Запишем необходимые граничные условия. Тангенциальные компоненты напряженности электрического поля внутри и снаружи жидкости совпадают на границе, в то время как нормальная компонента электрической индукции претерпевает скачок, пропорциональный поверхностной плотности свободного заряда [19]:

$$\frac{\partial \Phi_2}{\partial R} = \frac{\partial \Phi_3}{\partial R}, \quad \frac{1}{R} \left( \frac{\partial \Phi_2}{\partial \theta} - \varepsilon \frac{\partial \Phi_3}{\partial \theta} \right) = \frac{\sigma}{\varepsilon_0}, \quad \theta = \pi - \beta. \quad (3)$$

Здесь  $\varepsilon$  – диэлектрическая проницаемость жидкости. Аналогичные условия на границе спрея принимают простой вид

$$\frac{\partial\Phi_1}{\partial R} = \frac{\partial\Phi_2}{\partial R}, \quad \frac{\partial\Phi_2}{\partial\theta} = 0, \quad \theta = \gamma. \quad (4)$$

Вектор напряженности электрического поля имеет только радиальную составляющую на оси симметрии задачи, так что

$$\frac{\partial\Phi_3}{\partial\theta} = 0, \quad \theta = \pi. \quad (5)$$

Обозначим за  $\mu_v$  и  $\mu_s$  подвижности заряженных капель и ионов, которые дрейфуют через газ и, соответственно, по поверхности жидкости. Их скорости определяются соотношениями

$$V_v = -\mu_v \frac{\partial\Phi_1}{\partial R}, \quad V_s = -\mu_s \frac{\partial\Phi_3}{\partial R} \Big|_{\theta=\pi-\beta}.$$

С их учетом стационарные уравнения непрерывности для капель и ионов запишутся следующим образом:

$$\rho \left( \frac{\partial^2\Phi_1}{\partial R^2} + \frac{2}{R} \frac{\partial\Phi_1}{\partial R} \right) + \frac{\partial\rho}{\partial R} \frac{\partial\Phi_1}{\partial R} = 0, \quad (6)$$

$$\sigma \left( \frac{\partial^2\Phi_3}{\partial R^2} + \frac{1}{R} \frac{\partial\Phi_3}{\partial R} \right) + \frac{\partial\sigma}{\partial R} \frac{\partial\Phi_3}{\partial R} = 0, \quad \theta = \pi - \beta. \quad (7)$$

Различие в коэффициентах связано с тем, что движение капель – трехмерное, а ионов – двумерное.

Для упрощения постановки задачи мы не будем рассматривать движение жидкости в области 3 и связанные с ним эффекты (соответствующие ограничения на применимость модели обсуждаются в разделе 4.4). Тогда условием равновесия свободной поверхности жидкости является взаимная компенсация на ней капиллярного и электростатического [19] давлений

$$p_s = p_E, \quad (8)$$

$$p_s = \alpha R^{-1} \cot \beta,$$

$$p_E = \frac{\varepsilon_0}{2} \left( \frac{1}{R^2} \left( \frac{\partial\Phi_2}{\partial\theta} \right)^2 - \frac{\varepsilon}{R^2} \left( \frac{\partial\Phi_3}{\partial\theta} \right)^2 + (\varepsilon - 1) \left( \frac{\partial\Phi_2}{\partial R} \right)^2 \right),$$

где  $\alpha$  – коэффициент поверхностного натяжения жидкости, а выражение для  $p_E$  рассчитывается для угла  $\theta = \pi - \beta$ .

Система уравнений замыкается условием равенства электрических токов

$$I_s = I_v, \quad (9)$$

протекающих по поверхности жидкого конуса,

$$I_s = 2\pi R \mu_s \sin \beta \sigma \frac{\partial\Phi_3}{\partial R} \Big|_{\theta=\pi-\beta},$$

и через окружающий газ,

$$I_v = -2\pi R^2 \mu_v (1 - \cos \gamma) \rho \frac{\partial\Phi_1}{\partial R}.$$

В следующем разделе мы покажем, что уравнения (1)–(9) допускают точное аналитическое решение, что позволит определить связь между углами  $\beta$  и  $\gamma$ , а также величину протекающего через систему электрического тока  $I$  для различных значений параметров задачи  $\mu_v$ ,  $\mu_s$  и  $\varepsilon$ .

**3. Точное решение.** Согласно условию баланса давлений на поверхности жидкого конуса (8), электрическое поле, как и для классического конуса Тейлора, должно уменьшаться с расстоянием  $R$  как  $R^{-1/2}$ . Тогда потенциалы электрического поля будут удовлетворять одинаковому степенному закону  $\Phi_{1,2,3} \propto R^{1/2}$ . Как видно из (1), для плотности объемного заряда в таком случае должна выполняться зависимость  $\rho \propto R^{-3/2}$ . Важно отметить, что данное соотношение автоматически обеспечивает тождественное выполнение уравнения непрерывности (6). Далее, из уравнения (3) следует, что для плотности поверхностного заряда должен выполняться скейлинг  $\sigma \propto R^{-1/2}$ , что, в свою очередь, обеспечивает выполнение уравнения непрерывности (7). Тот факт, что тейлоровский скейлинг  $\Phi \propto R^{1/2}$  не нарушается при учете объемного заряда капель, испускаемых с вершины жидкого конуса и затем дрейфующих в конической области, был установлен в [21]. В [22] было показано, что этот скейлинг остается в силе при учете поверхностного ионного тока.

Соответствующая требуемому скейлингу подстановка  $\Phi = f(\theta)R^{1/2}$ , где  $f$  – некоторая функция полярного угла, сводит уравнение Лапласа (2) к обыкновенному дифференциальному уравнению на угловое распределение потенциала электрического поля:

$$3f/4 + f_{\theta\theta} + f_{\theta} \cot \theta = 0.$$

Его общее решение имеет вид

$$f = c_1 P_{1/2}(\cos \theta) + c_2 P_{1/2}(-\cos \theta),$$

где  $c_{1,2}$  – некоторые константы, а  $P_{1/2}$  – функция Лежандра порядка 1/2 (она выражается через гипергеометрическую функцию как  $P_{1/2}(x) = F(3/2, -1/2, 1, (1-x)/2)$ ). При использовании подстановок

$$\rho = BR^{-3/2}, \quad \sigma = DR^{-1/2}, \quad \Phi_1 = AR^{1/2},$$

$$\Phi_2 = C_1 P_{1/2}(\cos \theta) R^{1/2} + C_2 P_{1/2}(-\cos \theta) R^{1/2},$$

$$\Phi_3 = C_3 P_{1/2}(-\cos \theta) R^{1/2}$$

уравнения (1)–(9) сводятся к алгебраическим уравнениям на постоянные  $A$ ,  $B$ ,  $C_{1,2,3}$  и  $D$ . Они легко решаются, давая тем самым точное аналитическое решение рассматриваемой задачи.

Согласно получаемым решениям, ключевые параметры задачи  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\varepsilon$ , а также отношение подвижностей  $m \equiv \mu_v/\mu_s$  связаны довольно громоздким соотношением:

$$\frac{(1 - \varepsilon - G(\gamma)G(\beta) - \varepsilon F(\beta)G(\gamma))(F(\beta)G(\gamma) + 1)}{(G(\gamma) + F(\gamma))^2} = \frac{3m(1 - \cos \gamma) P_{1/2}^2(\cos \gamma)}{4 \sin^2 \beta P_{1/2}(\cos \beta) P'_{1/2}(\cos \beta)}, \quad (10)$$

где  $P'_{1/2}$  – производная функции Лежандра по аргументу, а также мы обозначили

$$F(x) = \frac{P_{1/2}(-\cos x)}{P_{1/2}(\cos x)}, \quad G(x) = \frac{P'_{1/2}(-\cos x)}{P'_{1/2}(\cos x)}.$$

Протекающий через систему электрический ток в рамках модели определяется выражением

$$I = I_s = I_v = -\pi \mu_v (1 - \cos \gamma) AB.$$

Введем также по аналогии с [22, 23] долю подвижного заряда  $w$  на поверхности конуса,

$$w = \frac{\sigma}{\sigma_\Sigma} = \frac{\sigma}{\sigma + \sigma_p},$$

где плотность поляризационного заряда задается выражением

$$\sigma_p = \frac{\varepsilon_0(\varepsilon - 1)}{R^{1/2}} C_3 P'_{1/2}(\cos \beta) \sin \beta.$$

Использование величины  $w$  оказывается полезным для интерпретации полученных решений.

**4. Анализ решений.** Полученное точное решение исходных уравнений позволяет построить зависимости угла разлета каплей  $\gamma$ , тока  $I$  и доли свободного заряда  $w$  от полуугла конуса  $\beta$  при различных значениях проницаемости  $\varepsilon$  и отношения подвижностей  $m$ . Анализируя эти зависимости, можно выделить в параметрической плоскости  $\{m, \varepsilon\}$  области с различным поведением системы. Карта режимов продемонстрирована на рис. 2. Имеется три области I, II и III, разделенные сепаратрисами (сплошная синяя и штриховая красная линии). Общей (тройной) точкой областей является  $m = m_c = 1$  и  $\varepsilon = \varepsilon_c \approx 17.6$ . Проанализируем режимы, соответствующие представленной на рис. 2 классификации.

**4.1. Область I.** Рассматриваемая область представляет собой полосу  $1 < \varepsilon < \varepsilon_c \approx 17.6$ . Для понимания характера зависимостей  $\gamma$ ,  $I$  и  $w$  от  $\beta$  удобно совместить данные при выбранном фиксированном значении  $\varepsilon$  и нескольких различных  $m$  (мы взяли  $\varepsilon = 5$  и

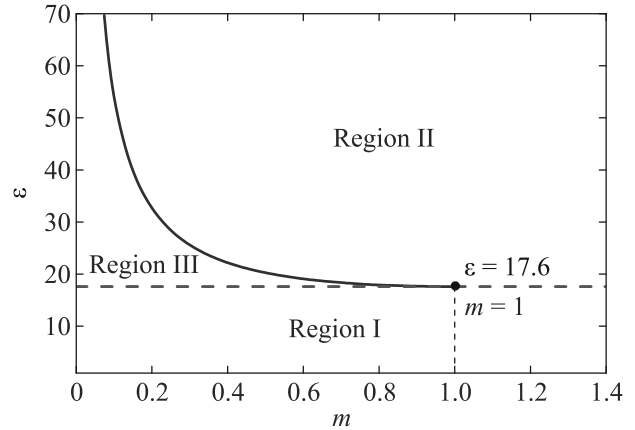


Рис. 2. (Цветной онлайн) Карта различных режимов на параметрической плоскости  $\{m, \varepsilon\}$

$m = 0.1, 0.5, 1$ ). Характерные зависимости  $\gamma$  от  $\beta$  показаны на рис. 3а. Видно, что угол разлета каплей  $\gamma$  монотонно убывает с увеличением угла конуса  $\beta$ . Таким образом, при наличии свободных поверхностных зарядов возможно существование конических острий на поверхности жидкости с диэлектрической проницаемостью, меньшей  $\varepsilon_c$  (напомним, что в отсутствие свободных зарядов равновесные конические образования в этой области не существуют – см. [20]). Обратим внимание на то, что решения имеются только в диапазоне углов конуса  $0 < \beta \leq \beta_T \approx 49.3^\circ$ . Таким образом, конус всегда заостряется относительно конуса Тейлора (эта тенденция является общей – она сохраняется и в областях II, III). Следует отметить, что различные углы  $\beta$  соответствуют разным значениям приложенной к системе разности потенциалов, которую естественно рассматривать в качестве внешнего управляющего параметра [25].

Как видно из рис. 3б, где представлены зависимости  $w$  от  $\beta$ , на поверхности конуса доминирует свободный заряд (величина  $w$  близка к единице). Поляризационный заряд отсутствует для крайних углов конуса  $\beta \rightarrow 0$  и  $\beta \rightarrow \beta_T$ , а его доля достигает максимума при углах около  $30^\circ$ . В целом доля свободного заряда незначительно уменьшается с ростом  $m$ .

На рисунке 3с показаны угловые зависимости безразмерного тока  $I/i_0$  (он нормирован на величину  $i_0 = \alpha \mu_v$ ). Как видно, ток обращается в нуль для крайних углов конуса  $\beta \rightarrow 0$  и  $\beta \rightarrow \beta_T$ , и достигает максимума при относительно малых углах  $< 15^\circ$ .

При  $m \rightarrow 0$  полученные зависимости будут стремиться к зависимостям, полученным Де Ла Мором для идеально проводящей жидкости [21]. Отметим, что в [21] демонстрировалось неплохое согласие между модельным соотношением между углами  $\gamma$  и  $\beta$  и экспериментальными данными для нескольких ре-

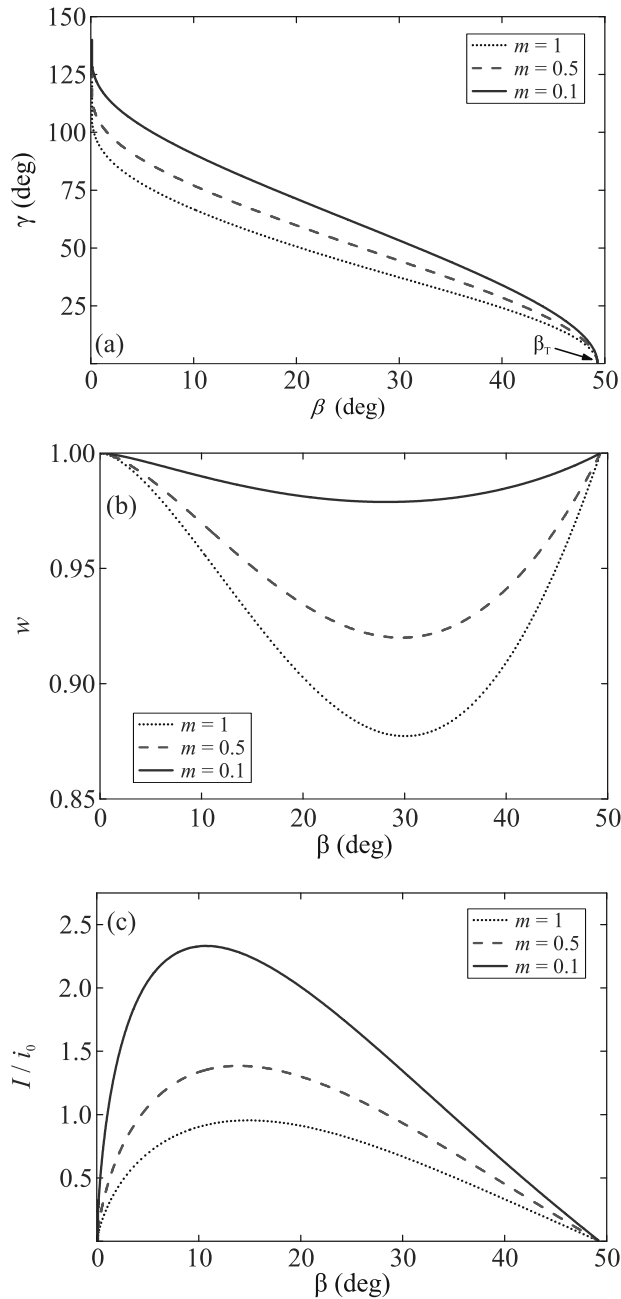


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимости от полуугла раствора жидкого конуса  $\beta$ : (a) – угла разлета капель  $\gamma$ , (b) – доли свободного поверхностного заряда  $w$  и (c) – нормированного на величину  $i_0 = \alpha\mu_v$  электрического тока  $I$  при  $\varepsilon = 5$  и  $m = 0.1, 0.5, 1$  (область I)

альных жидкостей (наблюдаемые углы относились к интервалам  $32^\circ < \beta < \beta_T$  и  $0 < \gamma < 42^\circ$ ).

При значениях  $m \gg 1$  влияние объемного заряда эмитируемых с вершины капель будет пренебрежимо малым – капли в силу большой подвижности быстро покидают прилегающую к острию область. Это соответствует рассмотренному в работах Субботина и

Семенова [22, 23] случаю, когда область вне жидкости электронейтральна.

4.2. *Области II и III.* При  $\varepsilon > \varepsilon_c \approx 17.6$  характер всех зависимостей становится значительно более сложным, и он радикально меняется при вариации  $m$ . Здесь, согласно рис. 2, существует два типа решений, разделенных сепаратрисой (синия сплошная линия). На рисунке 4 показаны зависимости от полуугла раствора жидкого конуса  $\beta$  угла разлета капель  $\gamma$ , доли свободного заряда на поверхности конуса  $w$  и протекающего через систему электрического тока  $I$  при  $\varepsilon = 25$  для  $m = 0.2, 0.3139, 1$ . Первое значение  $m$  попадает в область III, расположенную слева от сепаратрисы. Второе значение соответствует сепаратрисе. Третье значение  $m$  попадает в область II, расположенную справа от сепаратрисы.

Как видно, в области II (черные пунктирные линии на рис. 4) решения разделились на две отдельные ветви, соответствующие более острому и более тупым конусам. Решения существуют в диапазонах  $0 < \beta \leq \beta_1$  и  $\beta_2 \leq \beta \leq \beta_T$ , разделенных промежутком  $\beta_1 < \beta < \beta_2$ , в котором решений нет. При  $\beta = \beta_{1,2,T}$  имеем  $\gamma = 0$  (т.е. поток капель отсутствует) и, как следствие, электрический ток через конус не протекает. При этом для  $\beta = \beta_{1,2}$  будет  $w = 0$ , т.е. свободного поверхностного заряда нет. Эти точки соответствуют решениям Рамоса и Кастельяноса [20] для идеальной диэлектрической жидкости. Напротив, в точке  $\beta = \beta_T$  отсутствует поляризационный заряд,  $w = 1$ . Имеющийся свободный поверхностный заряд полностью экранирует поле внутри жидкости, что формально соответствует решению Тейлора. Предельный случай  $m \gg 1$  соответствует работам Субботина и Семенова [22, 23], где при значениях проницаемости  $\varepsilon > \varepsilon_c$  также имелся диапазон углов, в котором не было конических решений.

В области III (синие сплошные линии на рис. 4) также имеются две ветви решений, но уже совершенно иного типа – верхняя и нижняя. Верхняя ветвь родственна решениям из области I: угол разлета  $\gamma$  монотонно уменьшается во всем допустимом диапазоне углов жидкого конуса  $0 < \beta \leq \beta_T$ . Эта ветвь может рассматриваться как деформация решения Де Ла Моря для проводящего конуса [21] (оно совпадет с нашими решениями в пределе  $m \rightarrow 0$ ). В этом случае на поверхности доминирует свободный поверхностный заряд дрейфующих ионов (рис. 4b). Нижняя ветвь решений имеет колоколообразную форму и реализуется в промежутке  $\beta_1 \leq \beta \leq \beta_2$  с нулями, соответствующими решению Рамоса и Кастельяноса [20]. Здесь, в отличие от верхней ветви, доминирует поляризационный заряд (см. рис. 4b). При этом всю-



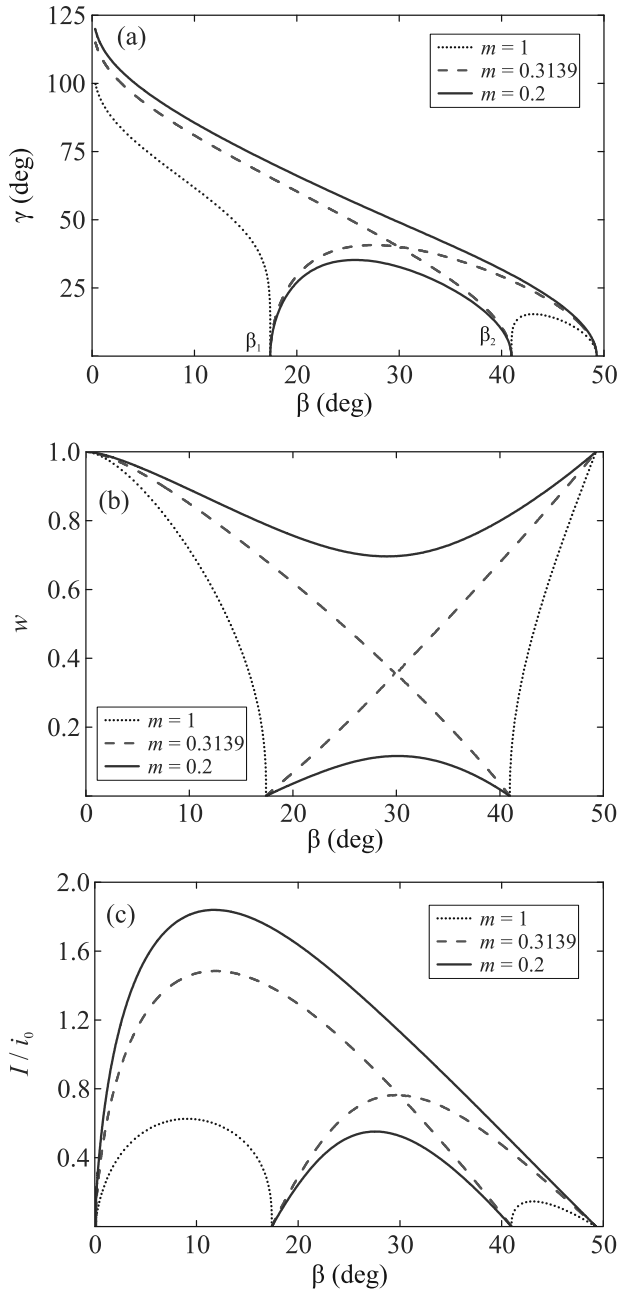


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимости от полуугла раствора жидкого конуса  $\beta$ : (а) – угла разлета капель  $\gamma$ , (б) – доли свободного поверхностного заряда  $w$  и (с) – нормированного на величину  $i_0$  электрического тока  $I$  при  $\varepsilon = 25$  и  $m = 0.2, 0.3139, 1$  (области II и III)

ду, за исключением крайних точек, свободного поверхностного заряда достаточно для протекания тока (рис. 4с). При высоких значениях  $\varepsilon$  для нижней ветви будет  $\beta_1 \rightarrow 0$  и  $\beta_2 \rightarrow \beta_T$ , а соответствующие ей решения асимптотически приближаются к верхней ветви. Это связано с тем, что при больших значениях диэлектрической проницаемости электрическое поле

не будет проникать в среду, т.е. его распределение будет таким же, как для проводящей жидкости.

На рисунке 4 также показаны зависимости (красные штриховые линии), соответствующие границе областей II и III на рис. 2. Видно, каким образом происходит пересоединение ветвей различного типа, реализующихся в областях II и III.

4.3. Граница области I и областей II, III. Рассмотрим теперь, что происходит на границе области I с областью III ( $\varepsilon = \varepsilon_c$  и  $m < 1$ ) и с областью II ( $\varepsilon = \varepsilon_c$  и  $m > 1$ ). Как видно из рис. 5а (мы взяли  $m = 0.5, 0.8, 1, 1.5$ ), при относительно малых значениях  $m$  мы имеем монотонно убывающую зависимость угла разлета  $\gamma$  от угла конуса  $\beta$  во всем допустимом диапазоне  $0 < \beta \leq \beta_T$ . Кроме того при  $\beta = 30^\circ$  на оси абсцисс  $\gamma = 0$  имеется отдельное решение в виде изолированной точки. В нее вырождается рассмотренное нами ранее – см. рис. 4 – куполообразное решение. С увеличением  $m$  зависимость перестает быть монотонной; на кривой появляется минимум. В точке  $m = 1$  (тройная точка на карте режимов – см. рис. 2) этот минимум превращается в клюв, который касается оси абсцисс при  $\beta = 30^\circ$  (указанная выше изолированная точка). Далее с ростом  $m$  клюв преобразуется в угол. Из рисунка 5б видно, что доля свободного поверхностного заряда минимальна при полуугле конуса в  $30^\circ$ , причем в этом минимуме величина  $w$  снижается с ростом  $m$ , достигая нуля при значениях  $m \geq 1$ . Как показывает рис. 5с, это сопровождается появлением локального минимума в угловой зависимости тока, причем ток обращается в нуль при  $\beta = 30^\circ$  для  $m \geq 1$ . Это связано с тем, что, с одной стороны, в этом случае отсутствуют свободные поверхностные заряды,  $\sigma = 0$ , и, с другой стороны, в нуль обращается угловой размер области спрея.

4.4. Ограничения на применимость модели. Основное ограничение связано с наличием факторов, приводящих к нарушению тейлоровского скейлинга. Так, если принять во внимание радиальный поток жидкости в области 3 с расходом  $Q$ , то в балансе давлений (8) появятся дополнительные слагаемые, ответственные за динамическое давление  $\rho u^2 \propto R^{-4}$  и вязкое напряжение  $\eta u R^{-1} \propto R^{-3}$ , где  $\rho$  – плотность жидкости,  $\eta$  – ее динамическая вязкость,  $u \propto QR^{-2}$  – скорость. Эти величины нарастают при приближении к вершине конуса быстрее капиллярного и электростатического давлений  $p_s \propto p_E \propto R^{-1}$ , что приводит на масштабе, меньшем  $(\rho Q^2/\alpha)^{1/3}$  [21] или  $(\eta Q/\alpha)^{1/2}$  [23] к отклонению формы поверхности от конической – формированию микроструй.

Далее, при формулировке математической модели (1)–(9) мы не стали рассматривать вихревое тече-

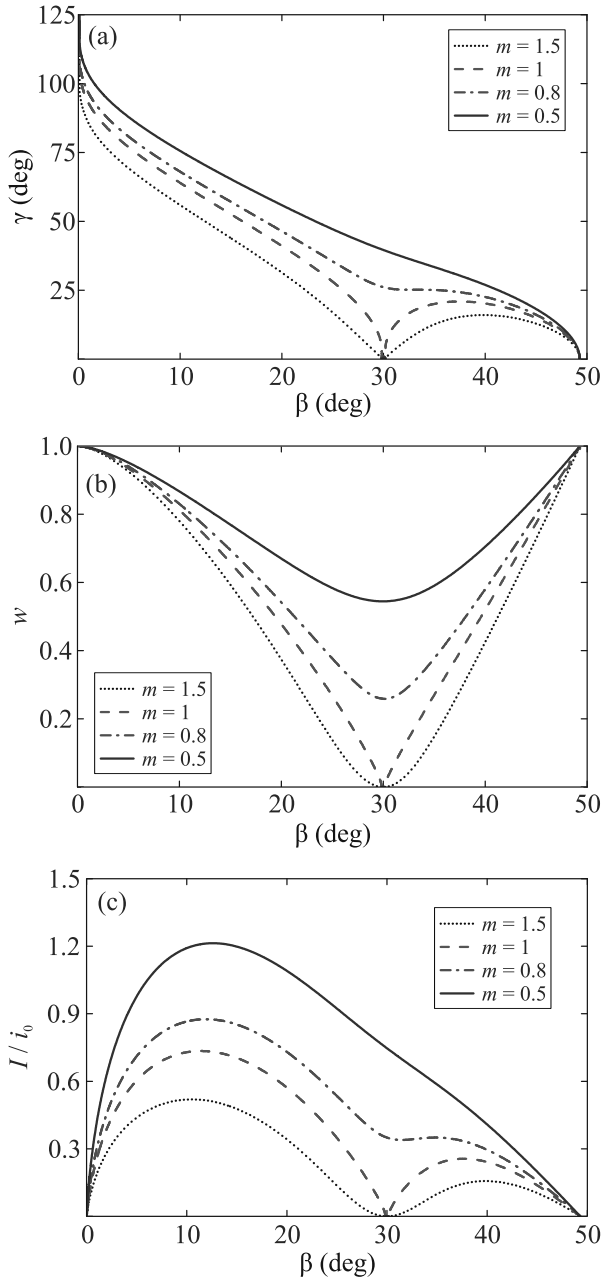


Рис. 5. (Цветной онлайн) Зависимости от угла  $\beta$  жидкого конуса: (а) – угла разлета капель  $\gamma$ , (б) – доли свободного поверхностного заряда  $w$  и (с) – нормированного на  $i_0$  электрического тока  $I$  при  $\varepsilon = \varepsilon_c \approx 17.6$  и  $m = 0.5, 0.8, 1, 1.5$  (граница области I и областей II, III)

ние в объеме жидкого конуса, возникающее за счет касательных электростатических сил на его границе. Согласно анализу [22, 23] характерная скорость течения оценивается как  $u \propto I/(\mu_s \eta)$  (здесь и ниже опущены коэффициенты, зависящие от угла  $\beta$ ), а тогда вязкое напряжение, которое следует учитывать в балансе давлений (8), не нарушает тейлоровско-

го скейлинга:  $\eta u R^{-1} \propto (I/\mu_s) R^{-1}$ . Соответствующая поправка в (8) будет мала и ей можно пренебречь при выполнении условия  $I \ll \mu_s \alpha$ . Важно, что при составлении карты режимов (рис. 2) и определении зависимостей угла разлета капель  $\gamma$  и доли свободного поверхностного заряда  $w$  от угла жидкого конуса  $\beta$  (рис. 3–5а, б) условие баланса давлений в упрощенном виде (8) напрямую не использовалось: принимался во внимание лишь следующий из него скейлинг  $\Phi \propto R^{1/2}$ . Как следствие, соответствующие зависимости останутся неизменными при учете вихревого движения жидкости. Поправка к (8) при невыполнении условия  $I \ll \mu_s \alpha$  приведет лишь к некоторой, не меняющей общую картину, деформации верхних частей угловых зависимостей тока (рис. 3–5с).

**5. Заключение.** В работе было исследовано коническое образование на свободной поверхности жидкости с поверхностной ионной проводимостью, вершина которого испускает в окружающий газ поток заряженных капель. Удалось найти точное аналитическое решение для распределения электрического поля вблизи вершины острия, а также для движения в этом поле заряженных частиц – ионов и капель. Полученное решение позволило определить зависимости между ключевыми параметрами задачи – углами жидкого конуса  $\beta$  и разлета капель  $\gamma$ , электрическим током  $I$ , долей свободного поверхностного заряда  $w$  при различных значениях диэлектрической проницаемости жидкости  $\varepsilon$  и отношения подвижностей носителей заряда, капель и ионов,  $m$ . Как видно из рис. 3–5, решения имеют весьма сложную, с различными сосуществующими ветвями, форму, которая качественно отличается в различных областях параметрической плоскости  $\{m, \varepsilon\}$  – см. карту возможных режимов на рис. 2. Полученные нами многопараметрические решения в частных и предельных случаях переходят в решения Тейлора [18] ( $\gamma = 0$  и  $w = 1$ ), Де Ла Мора [21] ( $m \rightarrow 0$ ), Рамоса и Кастельяноса [20] ( $\gamma = 0$  и  $w = 0$ ), Субботина и Семенова [22, 23] ( $m \rightarrow \infty$ ). Наши решения, соответственно, можно рассматривать как их обобщение.

**Финансирование работы.** Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда # 23-71-10012, <https://rscf.ru/project/23-71-10012/>.

**Конфликт интересов.** Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

1. L. Tonks, *Phys. Rev.* **48**, 562 (1935).
2. Я. И. Френкель, *ЖЭТФ* **6**(4), 348 (1936).
3. J.R. Melcher, *Field-Coupled Surface Waves*, MIT, Cambridge (1963).

4. В. М. Зайцев, М. И. Шлиомис, ДАН СССР **188**(6), 1261 (1969).
5. Е. А. Кузнецов, М. Д. Спектор, ЖЭТФ **71**, 262 (1976).
6. Н. М. Зубарев, О. В. Зубарева, ЖТФ **71**(7), 21 (2001).
7. А. И. Жакин, УФН **183**, 153 (2013).
8. L. M. Baskin, A. V. Batrakov, S. A. Popov, and D. I. Proskurovsky, IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul. **2**, 231 (1995).
9. Н. М. Зубарев, Письма в ЖЭТФ **73**(10), 613 (2001).
10. N. M. Zubarev, Phys. Rev. E **65**, 055301(R) (2002).
11. V. G. Suvorov and N. M. Zubarev, J. Phys. D: Appl. Phys. **37**, 289 (2004).
12. C. Zhou and S. M. Troian, Phys. Rev. Appl. **15**, 044001 (2021).
13. I. V. Uimanov, D. L. Shmelev, and S. A. Barenholts, Vacuum **220**, 112823 (2024).
14. М. Д. Габович, УФН **140**, 137 (1983).
15. W. Driesel, C. Dietzsch, and R. Mühle, J. Vac. Sci. Technol. B **14**, 3367 (1996).
16. R. G. Forbest, Vacuum **48**, 85 (1997).
17. S. Cândido and J. C. Páscoa, Phys. Fluids **35**, 052110 (2023).
18. G. I. Taylor, Proc. R. Soc. London, Ser. A **280**, 383 (1964).
19. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, ГИИТЛ, М. (1957).
20. A. Ramos and A. Castellanos, Phys. Lett. A **184**, 268 (1994).
21. J. F. De La Mora, J. Fluid Mech. **243**, 561 (1992).
22. А. В. Субботин, Письма в ЖЭТФ **100**, 741 (2014).
23. A. V. Subbotin and A. N. Semenov, Proc. R. Soc. A **471**, 20150290 (2015).
24. A. V. Subbotin and A. N. Semenov, JETP Lett. **107**, 186 (2018).
25. М. А. Беляев, N. M. Zubarev, and O. V. Zubareva, J. Electrostat. **107**, 103478 (2020).

# Surface spin polarization in the magnetic response of GeTe Rashba ferroelectric

A. A. Avakyants, N. N. Orlova<sup>1</sup>), A. V. Timonina, N. N. Kolesnikov, E. V. Deviatov

Institute of Solid State Physics of the Russian Academy of Sciences, 142432 Chernogolovka, Russia

Submitted 5 March 2024

Resubmitted 20 March 2024

Accepted 22 March 2024

DOI: 10.31857/S1234567824080081, EDN: URBDY

**I. Introduction.** Recent renewal of interest to semimetals is mostly connected with topological effects [1]. Among nonmagnetic topological Weyl semimetals (WSM), GeTe is of special interest [2–4] due to the reported giant Rashba splitting [4–7]. GeTe is predicted to be topological semimetal in ferroelectric  $\alpha$ -phase [8, 9]. Nonlinear Hall effect has been demonstrated in GeTe [10], which is the direct manifestation of finite Berry curvature in topological media [11]. The direct measurement of the Rashba-split surface states of  $\alpha$ -GeTe(111) has been experimentally realized thanks to K doping [12]. It has been shown that the surface states are not the result of band bending and that they are decoupled from the bulk states. The giant Rashba splitting of the surface states of  $\alpha$ -GeTe is largely arising from the inversion symmetry breaking in the bulk [12].

Thus, one can expect a complicated response of a topological semimetal GeTe on the external magnetic field due to the correlation between ferroelectricity and spin textures in GeTe [13], similarly to magnetoelectric structures [14].

GeTe single crystals were grown by physical vapor transport in the evacuated silica ampule. The powder X-ray diffraction analysis confirms single-phase GeTe. To investigate magnetic properties, we use Lake Shore Cryotronics 8604 VSM magnetometer, equipped with nitrogen flow cryostat. A small (0.82–9.54 mg) flake is mounted to the sample holder by low temperature grease, which has been tested to have a small, strictly linear magnetic response. We investigate sample magnetization by standard method of the magnetic field gradual sweeping between two opposite field values to obtain magnetization loops.

All three samples show clear low-field hysteresis in Fig. 1. To our surprise, the saturation level is negative

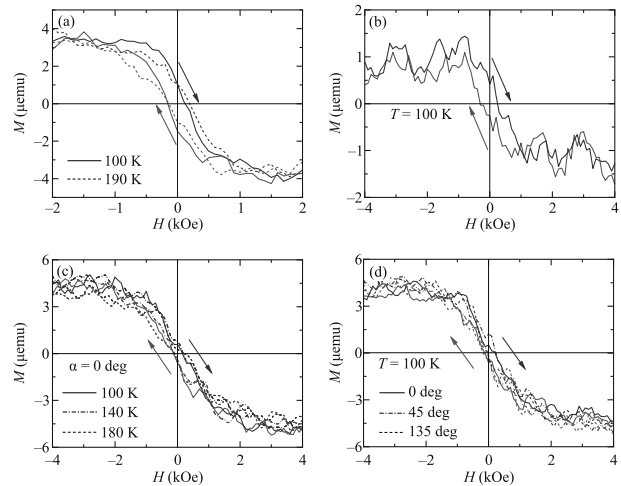


Fig. 1. (Color online) The low-field hysteresis region for all three samples. For every field sweep direction, we use curve averaging (8 curves) to increase the signal/noise ratio. The diamagnetic slope is subtracted from the averaged curves to highlight the nonlinear low-field behavior. (a) – Curves for the 6.69 mg GeTe flake at two temperatures, 100 K (solid) and 190 K (dash). (b) –  $M(H)$  curves for the smallest, 0.82 mg GeTe flake, at 100 K. (c), (d) – Hysteresis for the 9.54 mg flake at different temperatures (c) and sample orientation (d). For every sample, the saturation level is negative in positive fields, and the loop is passed clockwise, in contrast to usual ferromagnetic hysteresis

in positive fields, and the loop is passed clockwise, in contrast to usual ferromagnetic hysteresis.

We wish to note, that our unusual diamagnetic loop can not be considered as inverted hysteresis in the common sense (e.g. in terms of [15] and references therein). Indeed, usual inverted hysteresis implies two magnetic phases: the inversion reflects the phase interaction in this case, so one magnetic phase provides a bias field to the second one [16]. This bias field forces the magnetization reversal even before the reversal of the external field, so the loop is passed clockwise. In our case, we observe unusual diamagnetic loop, where the satu-

<sup>1</sup>)e-mail: honna@issp.ac.ru

ration level is inverted instead of the switching field. The saturation level is negative in positive fields, it is reversed after the external field reversal. Also, the remanence plots technique (i.e., Henkel or  $\delta M$  plots) does not confirm several magnetic phases for our GeTe flakes.

The experimental curves in Fig. 1 can not be continuously transformed to the standard ferromagnetic one by adding/subtracting of any linear dependence, which excludes any possible contribution from any magnetic contamination, e.g. magnetic impurities [17]. To rule out systematic error of the VSM, like possible remanent field in the electric magnet, etc., we demonstrate strictly linear diamagnetic dependence without GeTe sample for the same setup, the same sample holder, the same grease, and at the same temperature.

For these reasons, we should consider possible contribution from the surface-state induced spin textures [12] in  $\alpha$ -GeTe(111). Direct correlation between ferroelectricity and spin textures was demonstrated in GeTe [13]. Both the giant Rashba splitting of the surface states and bulk ferroelectricity are largely arising from the inversion symmetry breaking [12]. Thus, GeTe single crystal can be considered as magnetoelectric heterostructure [14].

In the conditions of our experiment, variation of the magnetic field leads to appearance of the electric field due to the magnetoelectric coupling [14, 18]. Electric field affects spin textures in GeTe [13], which, subsequently, affects magnetization response. In this case, the unusual diamagnetic loop appears due to the delay of the magnetic response to the external field, since electric fields are coupled to strain in ferroelectrics [14]. Thus, the unusual diamagnetic loop is a direct consequence of correlation between ferroelectricity and spin-polarized surface states in GeTe.

We wish to thank S. S. Khasanov for X-ray sample characterization.

**Funding.** We gratefully acknowledge financial support by the Russian Science Foundation, project RSF-23-22-00142, <https://rscf.ru/project/23-22-00142/>.

**Conflict of interest.** The authors of this work declare that they have no conflicts of interest.

This is an excerpt of the article “Surface spin polarization in the magnetic response of GeTe Rashba ferroelectric”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364024600605

1. N. P. Armitage, E. J. Mele, and A. Vishwanath, *Rev. Mod. Phys.* **90**, 015001 (2018); arxiv:1705.01111.
2. S. Varotto, L. Nesi, S. Cecchi et al. (Collaboration), *Nat. Electron.* **4**, 740 (2021).
3. S. Picozzi, *Frontiers in Physics. Condensed Matter Physics* **2**, 10 (2014).
4. N. N. Orlova, A. V. Timonina, N. N. Kolesnikov, and E. V. Deviatov, *Physica B: Condensed Matter* **647**, 414358 (2022); <https://doi.org/10.1016/j.physb.2022.414358>.
5. Djo Di Sante, P. Barone, R. Bertacco, and S. Picozzi, *Adv. Mater.* **25**, 509 (2013).
6. M. Liebmann, Ch. Rinaldi, D. Di Sante et al. (Collaboration), *Adv. Mater.* **28**, 560 (2016).
7. J. Krempaský, H. Volfová, S. Muff, N. Pilet, G. Landolt, M. Radović, M. Shi, D. Kriegner, V. Holý, J. Braun, H. Ebert, F. Bisti, V. A. Rogalev, V. N. Strocov, G. Springholz, J. Minár, and J. H. Dil, *Phys. Rev. B* **94**, 205111 (2016).
8. A. Lau and C. Ortix, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 186801 (2019).
9. J. Krempaský, L. Nicolaï, M. Gmitra, H. Chen, M. Fanciulli, E. B. Guedes, M. Caputo, M. Radović, V. V. Volobuev, O. Caha, G. Springholz, J. Minár, and J. H. Dil, *Phys. Rev. Lett.* **126**, 206403 (2021)
10. N. N. Orlova, A. V. Timonina, N. N. Kolesnikov, and E. V. Deviatov, *Chin. Phys. Lett.* **40**, 077302 (2023); <https://doi.org/10.1088/0256-307X/40/7/077302>.
11. I. Sodemann and L. Fu, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 216806 (2015).
12. G. Kremer, T. Jaouen, B. Salzmann, L. Nicolaï, M. Rumo, C. W. Nicholson, B. Hildebrand, J. H. Dil, J. Minár, G. Springholz, J. Krempaský, and C. Monney, *Phys. Rev. Research* **2**, 033115 (2020).
13. Ch. Rinaldi, S. Varotto, M. Asa, J. Ślawinska, J. Fujii, G. Vinai, S. Cecchi, D. Di Sante, R. Calarco, I. Vobornik, G. Panaccione, S. Picozzi, and R. Bertacco, *Nano Lett.* **18**, 2751 (2018).
14. P. C. Lou, R. G. Bhardwaj, A. Kataliha, W. P. Beyermann, and S. Kumar, *Phys. Rev. B* **109**, L081113 (2024); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.109.L081113>.
15. I. Soldatov, P. Andrei, and R. Schaefer, *IEEE Magn. Lett.* **11**, 2405805 (2020).
16. M. Saghayezhian, Zh. Wang, H. Guo, R. Jin, Y. Zhu, J. Zhang, and E. W. Plummer, *Phys. Rev. Research* **1**, 033160 (2019).
17. F. W. Constant and J. M. Forwalt, *Phys. Rev.* **56**, 373 (1939).
18. W. Xun, Ch. Wu, H. Sun, W. Zhang, Y.-Zh. Wu, and P. Li, arXiv:2403.01070.

# Магнитные переключения FSF-мостиков при низких температурах

Л. Н. Карелина, Н. С. Шуравин, С. В. Егоров, В. В. Больгинов<sup>1)</sup>, В. В. Рязанов

Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка, Россия

Поступила в редакцию 22 марта 2024 г.

После переработки 22 марта 2024 г.

Принята к публикации 22 марта 2024 г.

В статье представлены эксперименты по изучению вольт-амперных характеристик планарных микромостиков  $\text{Pd}_{0.99}\text{Fe}_{0.01}\text{-Nb-Pd}_{0.99}\text{Fe}_{0.01}$  при температурах существенно меньше критической. Обнаружено, что даже при таких температурах наблюдается эффект магнитной памяти, проявляющийся в зависимости формы вольт-амперных характеристик от взаимной ориентации намагниченностей F-слоев. Показано, что исследованный образец может функционировать в качестве магнитного переключателя с амплитудой изменения напряжения более 600 мкВ, что соответствует характеристической частоте около 300 ГГц при использовании таких мостиков в качестве элементов памяти в устройствах быстрой одноквантовой логики. Такие характеристики были получены при температуре  $0.93T_c$ , являющейся минимальной рабочей температурой реализованного элемента памяти. Обнаружен низковольтный режим работы образца, характеризующийся широким диапазоном допустимых токов питания.

DOI: 10.31857/S1234567824080093, EDN: VZQDOQ

**1. Введение.** Слоистые структуры сверхпроводник-ферромагнетик представляют большой интерес как для науки, так и для практических приложений. Спиновый антагонизм ферромагнетизма и сверхпроводимости приводит к ряду интересных физических явлений, связанных с возникновением пространственно-неоднородных состояний в F-слое [1] и генерацией триплетной сверхпроводимости [2]. В частности, может наблюдаться возвратная зависимость критической температуры от толщины F-слоя; гистерезисные кривые магнитосопротивления; зависимость критической температуры от угла разориентации магнитных моментов F-слоев в трехслойных FFS-структурах и т.д. Практический интерес к изучению слоистых FS-структур связан с возможностью реализации на их основе масштабируемых элементов сверхпроводниковой памяти [3, 4]. Действительно, изменение свойств таких объектов связано с влиянием магнитного состояния ферромагнетика на концентрацию носителей в сверхпроводнике, в отличие от джозефсоновских элементов, чувствительных к потоку намагниченности F-слоя (см. обзор в статье [5]). Поэтому запоминающие элементы на основе FSF- или SFF-мостиков (см. [3, 4]) обладают большим потенциалом миниатюризации. Более подробный обзор результатов предыдущих экспериментальных и теоретических работ на эти темы содержится в наших предыдущих статьях [6, 7].

В работах [6, 7] нами сообщалось о наблюдении гистерезисной кривой магнитосопротивления в микромостиках  $\text{Pd}_{0.99}\text{Fe}_{0.01}\text{-Nb-Pd}_{0.99}\text{Fe}_{0.01}$ . Использованный разбавленный ферромагнитный сплав  $\text{Pd}_{0.99}\text{Fe}_{0.01}$  является на сегодняшний день слабым из магнитных материалов в подобных экспериментах, причем интерес к исследованию сверхпроводящих гетероструктур на его основе определяется возможностью его использования в джозефсоновских запоминающих элементах [8]. Эффект представлял собой отрицательные пики магнитосопротивления в полях около  $H = 9\text{ Э}$ , противоположных исходно намагниченному состоянию. Несмотря на малую концентрацию магнитных атомов (около 1% ат.), исследованные образцы могли функционировать в качестве магнитных переключателей (фактически, сверхпроводниковых элементов памяти) благодаря способности к запоминанию низкорезистивного состояния [7]. Амплитуда эффекта, т.е. отличие напряжения в двух цифровых состояниях (“0” и “1”) составляло порядка 1 мкВ.

В работе [6] также было показано, что с уменьшением температуры в пределах сверхпроводящего перехода амплитуда магниторезистивного эффекта возрастает и достигает максимума в окрестности нижней границы перехода. При меньших температурах эффект исчезал, поскольку мостик становился сверхпроводящим во всем использованном диапазоне магнитных полей. Другими словами, амплитуда магниторезистивного эффекта прекращала

<sup>1)</sup>e-mail: bolg@issp.ac.ru

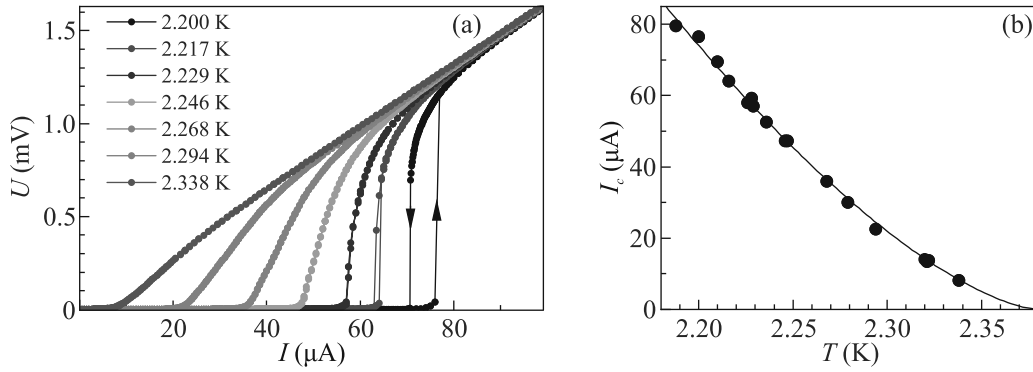


Рис. 1. (Цветной онлайн) (a) – ВАХ исследованного образца, измеренные при разных температурах ниже области сверхпроводящего перехода. Стрелками показано направление разветвки при температуре 2.200 К (черная кривая). (b) – Температурная зависимость критического тока образца. Линия показывает аппроксимацию при помощи ур. (1)

увеличиваться, когда критический ток образца начал превосходить выбранный ток смещения. В настоящей работе было проведено изучение вольт-амперных характеристик (ВАХ) микромостиков при низких температурах, которые продемонстрировали возможность многократного увеличения амплитуды изменения напряжения в сверхпроводящих элементах памяти на основе слоистых микроструктур  $\text{Pd}_{0.99}\text{Fe}_{0.01}\text{-Nb-Pd}_{0.99}\text{Fe}_{0.01}$ .

**2. Эксперимент.** Процедура изготовления образцов и проведения измерений описана в наших предыдущих работах [6, 7]. Было проведено изучение FSF-мостиков разных размеров. В данной работе представлены результаты на примере микромостика размером  $4 \times 20 \text{ мкм}^2$  с толщинами верхнего и нижнего F-слоев 22 и 45 нм соответственно и толщиной сверхпроводящего слоя 13 нм. Измерение температуры производилось при помощи калиброванного угольного термометра. Изменение температуры производилось со скоростью 1–4 мК/мин при помощи откачки паров  $^4\text{He}$ , а стабилизация температуры осуществлялась при помощи мембранного маностата Шаврина. Используемый метод изменения температуры позволяет обеспечить точность стабилизации около 1 мК на промежутке времени порядка 10 мин, необходимом для измерения ВАХ в обоих цифровых состояниях.

Особенностью “низкотемпературного” диапазона является нелинейная форма ВАХ, представленных на рис. 1а. Каждая ВАХ содержит “сверхпроводящий” участок с нулевым напряжением, который плавно переходит в линейный участок с большим дифференциальным сопротивлением  $dU/dI > R_N$  (далее – “промежуточный”), который, в свою очередь, плавно загибается и асимптотически приближается к линейной “омической” зависимости

$U = IR_N$ . Для всех кривых  $R_N$  составляет 16.6 Ом и, таким образом, не зависит ни от температуры, ни от магнитной предыстории мостика. При разных температурах ВАХ отличаются не только величиной критического тока, но и формой. При низких температурах напряжение на мостике появляется скачкообразно с ростом тока, а при самой низкой температуре наблюдается гистерезис из-за перегрева мостика в резистивном состоянии. При более высоких температурах скачок сглаживается, но перехода к джозефсоновской зависимости вида  $U = R_N \sqrt{T^2 - T_c^2}$  не наблюдается (см. рис. 2). Сам критический ток может быть определен либо путем линейной аппроксимации “промежуточного” участка к горизонтальной оси (величина  $I_c$  на рис. 2), либо по критерию нулевого напряжения (величина  $I_0$ ). В дальнейшем величина  $I_c$  будет рассматриваться в качестве критического тока, а величина  $I_0$  будет использоваться в иллюстративных целях.

Переход со сверхпроводящего на промежуточный участок, скорее всего, связан с достижением тока распаривания ниобиевого слоя. Действительно, температурная зависимость критического тока  $I_c$  FSF-мостика (см. рис. 1b) подчиняется хорошо известному закону для тока распаривания тонкой пленки [9].

$$I_c = I_c(0) \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{\frac{3}{2}}, \quad (1)$$

Аппроксимация данных на рис. 1b формулой (1) дает значение критической температуры  $T_c = 2.38 \text{ К}$ . С практической точки зрения важно, что дифференциальное сопротивление  $dU/dI$  на “промежуточном” участке увеличивается с понижением температуры. Именно это свойство позволяет получить большую амплитуду изменения напряжения при использова-

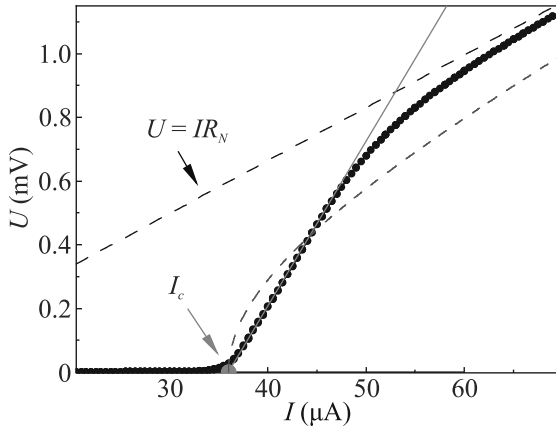


Рис. 2. (Цветной онлайн) ВАХ FSF-мостика при температуре 2.268 К. Сплошная прямая (зеленая) иллюстрирует процедуру определения критического тока  $I_c$  по линейному участку ВАХ с большим дифференциальным сопротивлением. Штриховыми линиями показаны омическая асимптота  $U = IR_N$  (черная) и джозефсоновская гипербола  $U = R_N \sqrt{I^2 - I_c^2}$  (красная)

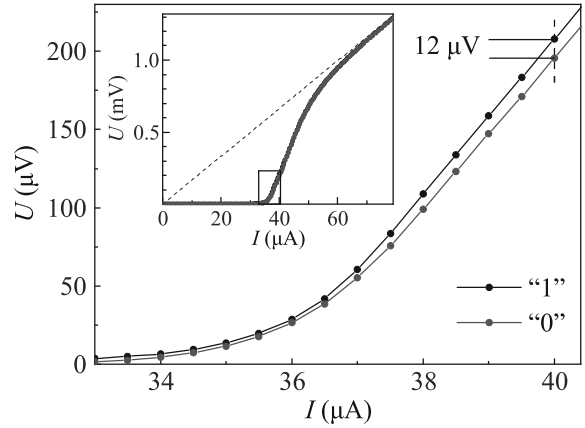


Рис. 4. (Цветной онлайн) ВАХ (в увеличенном масштабе, обозначен прямоугольником на вставке) мостика при  $T = 2.268$  К для состояний “0” (красные точки) и “1” (черные точки). На вставке те же кривые в полном диапазоне. Синим пунктиром обозначена асимптота  $U = IR_N$

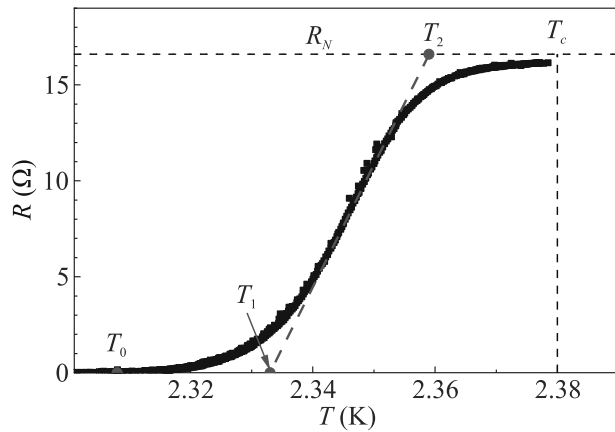


Рис. 3. (Цветной онлайн) Температурная зависимость сопротивления образца в области сверхпроводящего перехода при токе питания 10 мкА. Красными точками отмечены характерные температуры (см. определения в тексте). Черными штриховыми линиями отмечены сопротивление в нормальном состоянии и критическая температура, определенная путем аппроксимации температурной зависимости критического тока (см. обсуждение в тексте)

нии исследованного образца в качестве элемента памяти (см. ниже).

Интересно сопоставить поведение ВАХ с результатами измерения температурной зависимости сопротивления образца, представленной на рис. 3. Сопротивление обычно определяется как полуразность напряжений на образце при положительной и отрицательной полярности тока смещения  $I_b$ , отнесенная

к удвоенной величине этого тока. При отклонении формы ВАХ от линейной этот подход становится неточным, что создает трудности в определении критической температуры. В частности, на рис. 3 можно выделить следующие характерные значения: температура  $T_0 \approx 2.308$  К, при которой появляется ненулевое сопротивление, и температуры  $T_1 \approx 2.333$  К и  $T_2 \approx 2.359$  К, определенные из пересечений линейной аппроксимации с прямыми  $R = 0$  и  $R = R_N$  соответственно. Температуры  $T_{1,2}$  определяют положение области сверхпроводящего перехода  $T_1 < T < T_2$  и ее ширину  $\Delta T_{12} = T_2 - T_1 \approx 26$  мК. Видно, что весь резистивный переход лежит ниже температуры  $T_c = 2.38$  К, определенной из уравнения (1):  $T_0 < T_1 < T_2 < T_c$ . Интересно, что для температуры  $T_1$  выполняется условие  $I_c(T_1) = 10.0$  мкА =  $I_b$ , где  $I_c(T_1)$  – критический ток, определенный согласно ур. (1). Исчезновение магниторезистивного эффекта при  $T < T_1$ , наблюдавшееся в предыдущих экспериментах [6], связано, очевидно, с нарушением условия  $I_c(T) < I_b$ .

Таким образом, при исследовании образцов с нелинейными ВАХ сопротивление является не очень удобной величиной. Правильнее говорить о влиянии магнитной предыстории образца на форму ВАХ. Мы обнаружили, что этот эффект действительно наблюдается для исследованных нами образцов, причем в довольно широком температурном диапазоне (более  $4\Delta T_{12}$ ). На рисунке 4 показаны ВАХ, снятые для цифровых состояний “0” и “1” при температуре 2.268 К, которая заметно меньше нижней границы области сверхпроводящего перехода (меньше  $T_0$



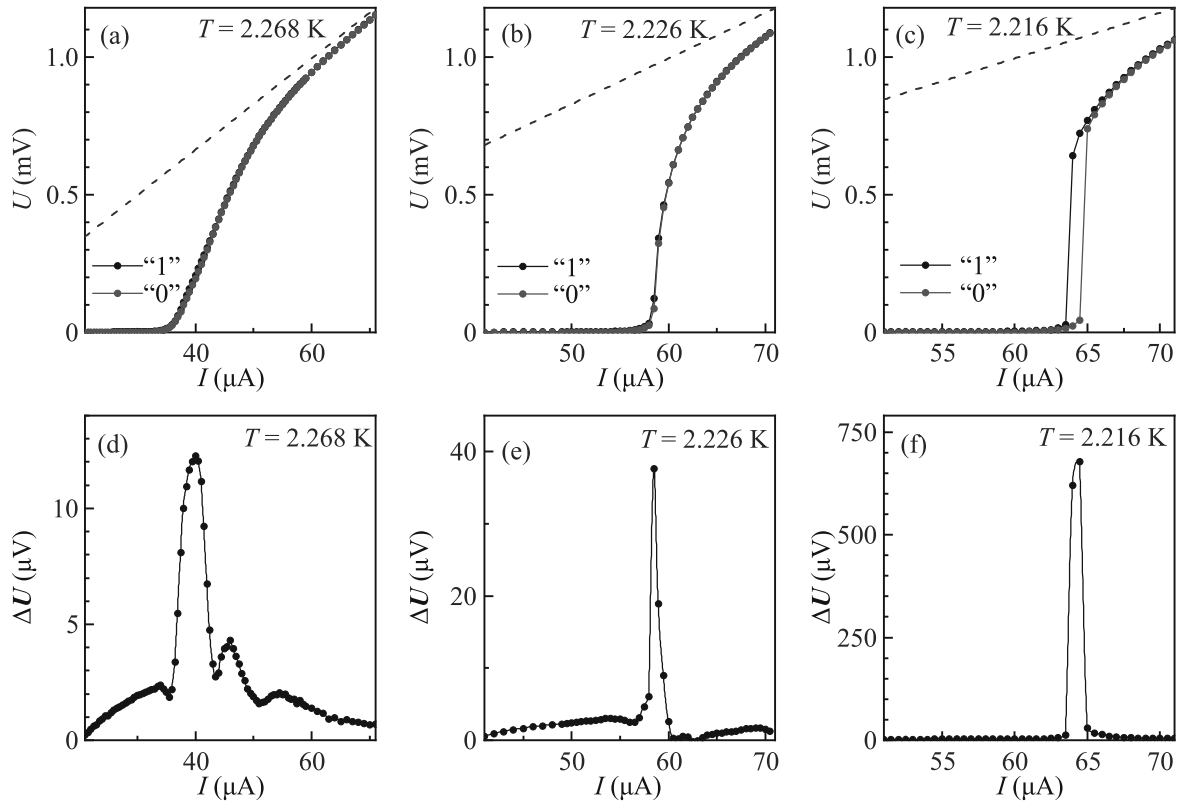


Рис. 5. (Цветной онлайн) (a)–(c) – ВАХ образца в двух цифровых состояниях (“1” – черные точки и “0” – красные точки) для трех температур меньше  $T_c$  (приведены на графиках). Штриховыми линиями обозначена асимптота  $U = IR_N$ . (d)–(f) – Разность вольт-амперных характеристик для состояний “0” и “1” при этих же температурах

на 40 мК и меньше  $T_1$  на 65 мК). Переключения между цифровыми состояниями производились импульсами магнитного поля, подобранными из частичных петель магнетосопротивления, как было описано в статье [7]. На первый взгляд (см. вставку к рис. 4) кривые кажутся идентичными как по уровню критического тока, так и по сопротивлению в нормальном состоянии. Однако в увеличенном масштабе (см. рис. 4) видно, что на “промежуточном” участке черная и красная кривые заметно расходятся. Поэтому при использовании тока смещения, например, 40 мкА амплитуда эффекта возрастет до 12 мкВ. Это уже примерно на порядок больше, чем было получено в нашей предыдущей работе [7] при токе смещения 20 мкА.

Более наглядное представление зависимости амплитуды магниторезистивного эффекта от выбора тока смещения может быть получено путем вычитания ВАХ, полученных для состояний “0” и “1”. Результат этой процедуры представлен на рис. 5 для трех температур: 2.268, 2.228 и 2.216 К. Видно, что разностная кривая (рис. 5d–f) имеет выраженный пик на “промежуточном” участке ВАХ. Пик распо-

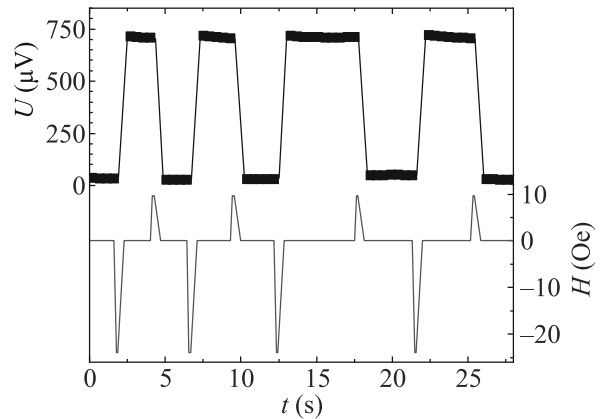


Рис. 6. (Цветной онлайн) Переключение FSF-мостика (черная кривая) между двумя логическими состояниями при помощи импульсов внешнего магнитного поля (красная кривая).  $T = 2.214$  К,  $I_b = 64.9$  мкА

ложен ближе к началу промежуточного участка (т.е. вблизи критического тока). Поэтому оптимальная величина тока смещения при понижении температуры растет. Ширина пика уменьшается с понижением температуры: от примерно 5 мкА ( $0.14I_c$ ) на рис. 5d,

до примерно 1 мкА ( $0.02I_c$ ) на рис. 5f и e. Это, по всей видимости, происходит вследствие уменьшения ширины “промежуточного” участка. Увеличение дифференциального сопротивления на “промежуточном” участке ВАХ при понижении температуры приводит к увеличению высоты разностного пика: от 12 мкВ при  $T = 2.268$  К до 40 мкВ при  $T = 2.228$  К и далее вплоть до 675 мкВ при  $T = 2.216$  К (см. рис. 5, панели (d), (e) и (f) соответственно). Максимальное значение (675 мкВ) соответствует минимальной рабочей температуре изучаемого FSF-микромостика как элемента памяти ( $0.93T_c$ ), которая определяется условием однозначности ВАХ (см. рис. 1a). Большое значение напряжения в резистивном состоянии достигается за счет увеличенного значения  $I_c$  (64 мкА) и большого дифференциального сопротивления (более  $70R_N$ ). Несмотря на малую ширину разностного пика при  $T = 2.216$  К, или, другими словами, допустимого диапазона токов смещения, исследуемый образец может при этой температуре функционировать в качестве элемента памяти. На рисунке 6 представлена временная диаграмма напряжения на микромостике, переключаемого между цифровыми состояниями (рис. 6, верхняя кривая) под действием импульсов приложенного магнитного поля (рис. 6, нижняя кривая). Уровни напряжения составляют 30 и 710 мкВ. Напряжение в состоянии “1” соответствует характеристической частоте  $f = U/\Phi_0 \approx 340$  ГГц. Стабильность цифровых состояний наблюдается на временах не менее десятков секунд.

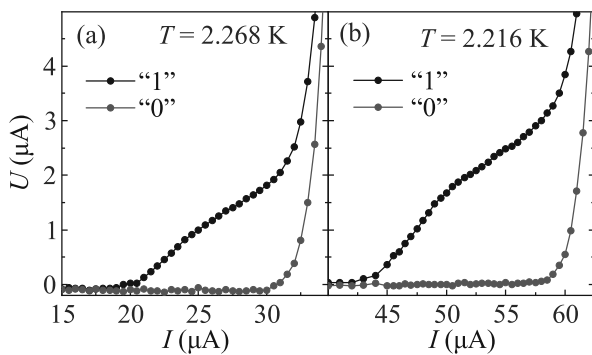


Рис. 7. (Цветной онлайн) ВАХ мостика в двух цифровых состояниях (“1” — черные точки и “0” — красные точки) в диапазоне низких напряжений. Панель (a) — соответствует рис. 5a, а панель (b) — рис. 5c

Интересные явления наблюдаются в диапазоне малых напряжений — единиц микровольт. В этой области форма вольт-амперных кривых и значение  $I_0$  существенно отличается для состояний “0” и “1”. На рис. 7a и b показаны ВАХ для двух цифровых состо-

яний в увеличенном масштабе по напряжению при  $I_0 \lesssim I \lesssim I_c$ . Для состояния “0” разность  $I_c - I_0^{(0)} \approx 5$  мкА и не зависит от температуры. Для состояния “1” разность  $I_c - I_0^{(1)}$  существенно зависит от температуры и составляет от 8 мкА при  $T = 2.320$  К до 21 мкА при  $T = 2.216$  К. Другими словами, в состоянии “0” нулевое напряжение сохраняется практически до величины критического тока, тогда как в состоянии “1” наблюдается незначительный рост напряжения (“низковольтное состояние”) даже при токах меньше критического на 30–60%. Таким образом, в этом диапазоне токов возможны логические переключения с амплитудой до 2–3 мкВ, что соответствует характеристической частоте около 1–1.5 ГГц. Это не очень большая величина, однако, она способна обеспечить частотную совместимость исследованных мостиков с элементами быстрой однокуантовой логики.

Выяснение природы низковольтного состояния FSF-микромостиков будет предметом следующих работ на эту тему. Например, напряжение в этом состоянии может быть связано с движением вихрей Абрикосова (flux-flow режим), созданных в тонком слое ниобия полями рассеяния слоев  $\text{Pd}_{0.99}\text{Fe}_{0.01}$ . Похожие явления наблюдались в работе [10]. Основным преимуществом низковольтного режима являются переключения между чисто сверхпроводящим (“0”) и резистивным (“1”) состояниями мостика. Низковольтный режим значительно менее требователен к стабилизации температуры, поскольку обладает гораздо более широким диапазоном допустимых токов смещения (30–40%  $I_c$  на рис. 7). Поэтому вероятность ошибочного считывания (bit error rate) в этом режиме должна быть гораздо меньше. Преимуществом высоковольтного режима (рис. 6) является большая амплитуда изменения напряжения и связанная с этим большая характеристическая частота. Поэтому выбор режима работы мостика в качестве сверхпроводникового элемента памяти должен определяться исходя из поставленной практической задачи.

**3. Заключение.** В данной работе было проведено изучение ВАХ FSF-микромостика  $\text{Pd}_{0.99}\text{Fe}_{0.01}\text{-Nb-Pd}_{0.99}\text{Fe}_{0.01}$  при температурах ниже области сверхпроводящего перехода. Продемонстрировано, что магнитная предыстория образца оказывает заметное влияние на форму экспериментальных кривых. Наибольший эффект наблюдается в окрестности критического тока и растет с понижением температуры. Это позволяет увеличить амплитуду магниторезистивных эффектов в десятки раз и реализовать магнитные запоминающие элементы

с амплитудой переключения напряжения в сотни микровольт.

**4. Финансирование работы.** Работа выполнена в рамках государственного задания Института физики твердого тела имени Ю. А. Осипьяна Российской академии наук.

**5. Конфликт интересов.** Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов при выполнении данной работы.

- 
1. А. И. Ларкин, Ю. Н. Овчинников, *ЖЭТФ* **47**, 1136 (1964).
  2. F. S. Bergeret, A. F. Volkov, and K. V. Efetov, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 1321 (2005).
  3. L. R. Tagirov, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 2058 (1999).
  4. S. Oh, D. Youm, and M. R. Beasley, *Appl. Phys. Lett.* **71**, 2376 (1997).
  5. L. N. Karelina, R. A. Novhannisyan, I. A. Golovchanskiy, V. I. Chichkov, A. Ben Hamida, V. S. Stolyarov, L. S. Uspenskaya, Sh. A. Erkenov, V. V. Bolginov, and V. V. Ryzanov, *J. Appl. Phys.* **130**, 173901 (2021).
  6. Л. Н. Карелина, В. В. Больгинов, Ш. А. Эркенов, С. В. Егоров, И. А. Головчанский, В. И. Чичков, А. Бен Хамида, В. В. Рязанов, *Письма в ЖЭТФ* **112**, 743 (2020).
  7. Л. Н. Карелина, Н. С. Шуравин, А. С. Ионин, С. В. Бакурский, С. В. Егоров, И. А. Головчанский, В. И. Чичков, В. В. Больгинов, В. В. Рязанов, *Письма в ЖЭТФ* **116**, 108 (2022).
  8. T. I. Larkin, V. V. Bol'ginov, V. S. Stolyarov, V. V. Ryzanov, I. V. Vernik, S. K. Tolpygo, and O. A. Mukhanov, *Appl. Phys. Lett.* **100**, 222601 (2012).
  9. В. В. Шмидт, *Введение в физику сверхпроводников*, 2-е изд., МЦНМО, М. (2000).
  10. В. В. Рязанов, В. А. Обознов, А. С. Прокофьев, С. В. Дубонос, *Письма в ЖЭТФ* **77**, 43 (2003).

# Theory of Lee–Naughton–Lebed's oscillations in moderately strong electric fields in layered quasi-one-dimensional conductors

A. G. Lebed<sup>1)</sup>

Department of Physics, University of Arizona, 1118 E. 4-th Street, Tucson, AZ 85721, USA

L. D. Landau Institute for Theoretical Physics, Russian Academy of Sciences, 117334 Moscow, Russia

Submitted 4 March 2024

Resubmitted 23 March 2024

Accepted 28 March 2024

DOI: 10.31857/S123456782408010X, EDN: XKYXBQ

Metallic phases of layered quasi-one-dimensional (Q1D) organic materials are very unusual and demonstrate two original types of angular magnetic oscillations: the so-called Lebed's magic angles (LMA) [1] and the Lee–Naughton–Lebed's (LNL) oscillations [1–8]. As to the LMA effects, they still contain lots of unexplained features, whereas the LNL oscillations are well explained by present moment [6, 9–15]. More recently Kobayashi et al. in the pioneering work [16] have considered effects of moderately strong electric fields on the LNL phenomenon and, in particular, have experimentally shown that the strong electric field splits the LNL maxima of conductivity. The goal of our paper is to show that the hypothetical formula of [16] can be obtained by using some moderately high electric field approximation for quasi-classical extension of the Boltzmann kinetic equation.

Let us consider the following Q1D Fermi surface in a layered conductor in a tight-binding model:

$$\epsilon(\mathbf{p}) = \pm v_F(p_x \mp p_F) + 2t_b \cos(p_y b^*) + 2t_\perp \cos(p_z d_\perp),$$

$$v_F p_F \gg t_b \gg t_\perp. \quad (1)$$

Under the condition of the LNL experiment the Q1D conductor is placed in the inclined magnetic field,

$$\mathbf{H} = H (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta), \quad (2)$$

whereas the constant electric field is applied perpendicular to the conducting layers,

$$\mathbf{E} = E (0, 0, 1). \quad (3)$$

In the so-called  $\tau$ -approximation, the Boltzmann kinetic equation can be written as [10]:

$$\left\{ e\mathbf{E} + \left( \frac{e}{c} \right) [\mathbf{v}(\mathbf{p}) \times \mathbf{H}] \right\} \frac{dn(\mathbf{p})}{d\mathbf{p}} = - \frac{n(\mathbf{p}) - n_0(\mathbf{p})}{\tau}. \quad (4)$$

Using the standard approach, we can now represent the quasi-classical Boltzmann kinetic equation (4) in the following form:

$$e\mathbf{E}\mathbf{v}(\mathbf{p}) \left[ \frac{dn_0(\epsilon)}{d\epsilon} - \frac{d^2 n_0(\epsilon)}{d\epsilon^2} \Psi(\mathbf{p}) \right] - \left\{ e\mathbf{E} + \left( \frac{e}{c} \right) [\mathbf{v}(\mathbf{p}) \times \mathbf{H}] \right\} \frac{dn_0(\epsilon)}{d\epsilon} \frac{d\Psi(\mathbf{p})}{d\mathbf{p}} = \frac{dn_0(\epsilon)}{d\epsilon} \frac{\Psi(\mathbf{p})}{\tau}. \quad (5)$$

Note that the Boltzmann kinetic equation is usually studied in metals in small electric fields, whereas the magnetic fields can be strong. Therefore, there is usually considered a variant of the equation, which is linear with respect to the electric field. Since  $\Psi(\mathbf{p})$  and  $d\Psi(\mathbf{p})/d\mathbf{p}$  are both proportional to electric field, the following two terms

$$-e\mathbf{E}\mathbf{v}(\mathbf{p}) \frac{d^2 n_0(\epsilon)}{d\epsilon^2} \Psi(\mathbf{p}) - e\mathbf{E} \frac{dn_0(\epsilon)}{d\epsilon} \frac{d\Psi(\mathbf{p})}{d\mathbf{p}} \quad (6)$$

are usually omitted in the Boltzmann equation (5) (see, for example, [9, 10]). In this article, for the first time we theoretically consider the case of moderately strong electric fields, where we disregard the first term but keep the second one of the above mentioned two terms (6). It is easy to see that we can disregard the first term in Eq. (6), if it much less than the right side of Eq. (5):

$$\left| e\mathbf{E}\mathbf{v}(\mathbf{p}) \frac{d^2 n_0(\epsilon)}{d\epsilon^2} \Psi(\mathbf{p}) \right| \ll \left| \frac{dn_0(\epsilon)}{d\epsilon} \frac{\Psi(\mathbf{p})}{\tau} \right|. \quad (7)$$

Since

$$|\mathbf{v}(\mathbf{p})| = |-2t_\perp d_\perp \sin(p_z d_\perp)| \sim t_\perp d_\perp \quad (8)$$

and

$$\left| \frac{d^2 n_0(\epsilon)}{d\epsilon^2} \right| \sim \frac{1}{T} \left| \frac{dn_0(\epsilon)}{d\epsilon} \right|, \quad (9)$$

Equation (7) can be rewritten as

$$eE(t_\perp d_\perp)\tau \ll T. \quad (10)$$

<sup>1)</sup>e-mail: lebed@arizona.edu

The physical meaning of Eqs. (7)–(10) is now clear. Electric field has to be small enough in order not to change electron energy on the scale of the temperature. As a result of disregarding the above discussed term in Eq. (5), instead of Eq. (5), we obtain

$$e\mathbf{E}\mathbf{v}(\mathbf{p}) - \left\{ e\mathbf{E} + \left( \frac{e}{c} \right) [\mathbf{v}(\mathbf{p}) \times \mathbf{H}] \right\} \frac{d\Psi(\mathbf{p})}{d\mathbf{p}} = \frac{\Psi(\mathbf{p})}{\tau}. \quad (11)$$

It is important that Eq. (11) is different from the weak electric field approximation equations considered in [9, 10] and, thus, we call the former equation the quasi-classical kinetic equation for moderately strong electric fields.

Straightforward calculations [10] result in the following expression for the total conductivity:

$$\begin{aligned} \sigma_{zz}(\theta, \phi, E, H) &= \frac{\sigma_{zz}(0)}{2} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} J_n^2 \left[ \frac{\omega_c^*(\theta, \phi)}{\omega_b(\theta)} \right] \\ &\times \left\{ \frac{1}{1 + [\omega_c(\theta, \phi) + \omega_E - n\omega_b(\theta)]^2 \tau^2} \right. \\ &\left. + \frac{1}{1 + [\omega_c(\theta, \phi) - \omega_E - n\omega_b(\theta)]^2 \tau^2} \right\}. \quad (12) \end{aligned}$$

Note that Eq. (12) describes splitting of the LNL maxima of conductivity for the LNL oscillations (see Fig. 2 of [16]). Indeed, in pure layered Q1D metals it has two maxima at

$$\omega_c(\theta, \phi) = n\omega_b(\theta) \pm \omega_E \quad (13)$$

or

$$\tan(\theta^\pm) \sin(\phi) = n \left( \frac{b^*}{d_\perp} \right) \pm \frac{Ec}{v_F H \cos(\theta)}, \quad (14)$$

where  $n$  is an integer. We note that, using Eq. (14) and experimental data on splitting the LNL maxima, the authors of work [16] evaluated the Fermi velocity  $v_F$  (1) in compound  $\alpha$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>KHg(SCN)<sub>4</sub>, corresponding to open sheets of the Fermi surface,  $v_F \simeq \simeq 10^7$  cm/s. We suggest to use the above described effect to determine Fermi velocities in other Q1D conductors, where heating of a sample under experiment allows to observe such splitting and where inequality (10) is fulfilled.

To summarize we stress that the derived above in moderately high electric fields (i.e., when inequality (10) is fulfilled). Eq. (12) was guessed in [16] as a strict equation, which is not correct. Although Eq. (12) coincides with Eq. (4) from [16], we have to check if inequality (10) is true under the experimental conditions of [16]. Indeed, the experimental conditions were the following: voltage  $V = 2\text{--}20$  V, thickness of the sample  $d = 0.1$  mm, temperature  $T = 1.8$  K [16]. If we take into account

the following band structure parameters of  $\alpha$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>KHg(SCN)<sub>4</sub> organic material [16]:  $d_\perp = 20$  Å [1] and  $t_\perp \simeq 30$  μeV [1], then at  $V = 2$  V, Eq. (10) can be written as

$$eE(t_\perp d_\perp)\tau \simeq 0.14 \text{ K} \ll T = 1.8 \text{ K}, \quad (15)$$

whereas at  $V = 20$  V both sides of Eq. (10) become of the same order. So, although the overall comparison of the experimental results [16] with the theoretical Eq. (12) can be justified at small voltages, at high voltages this has to be done with some caution.

The author is thankful to N. N. Bagmet (Lebed) for useful discussions.

**Funding.** This work was supported by ongoing University of Arizona funding. No additional grants to carry out or direct this particular research were obtained.

**Conflict of interests.** The author of this work declares that he has no conflicts of interest.

This is an excerpt of the article “Theory of Lee–Naughton–Lebed’s oscillations in moderately strong electric fields in layered quasi-one-dimensional conductors”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364024600915

1. *The Physics of Organic Superconductors and Conductors*, Ed. by A. G. Lebed, Springer-Verlag, Berlin (2008).
2. M. J. Naughton, I. J. Lee, P. M. Chaikin, and G. M. Danner, *Synth. Met.* **85**, 1481 (1997).
3. H. Yoshino, K. Saito, H. Nishikawa, K. Kikuchi, K. Kobayashi, and I. Ikemoto, *J. Phys. Soc. Jpn.* **66**, 2248 (1997).
4. I. J. Lee and M. J. Naughton, *Phys. Rev. B* **57**, 7423 (1998).
5. I. J. Lee and M. J. Naughton, *Phys. Rev. B* **58**, R13343 (1998).
6. A. G. Lebed and M. J. Naughton, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 187003 (2003).
7. A. G. Lebed, H.-I. Ha, and M. J. Naughton, *Phys. Rev. B* **71**, 132504 (2005).
8. H. I. Ha, A. G. Lebed, and M. J. Naughton, *Phys. Rev. B* **73**, 033107 (2006).
9. R. H. McKenzie and P. Moses, *Phys. Rev. B* **60**, R11241 (1999).
10. A. G. Lebed and M. J. Naughton, *J. Phys. IV (France)* **12**, 369 (2002).
11. T. Osada, *Physica E* **12**, 272 (2002).
12. T. Osada and M. Kuraguchi, *Synth. Met.* **133–134**, 75 (2003).
13. A. Banerjee and V. Yakovenko, *Phys. Rev. B* **78**, 125404 (2008).
14. B. K. Cooper and V. M. Yakovenko, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 037001 (2006).
15. S. Wu and A. G. Lebed, *Phys. Rev. B* **82**, 075123 (2010).
16. K. Kobayashi, M. Saito, E. Omichi, and T. Osada, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 126601 (2006).

# Влияние липидных конформаций на энергию взаимодействия мембраны и периферического белка

П. Е. Вольнский<sup>+</sup>, А. С. Алексеева<sup>+</sup>, И. А. Болдырев<sup>\*1)</sup>

<sup>+</sup>Институт биоорганической химии им. Ю. А. Овчинникова и М. М. Шемякина РАН, 117997 Москва, Россия

<sup>\*</sup>Институт физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина РАН, 119071 Москва, Россия

Поступила в редакцию 21 февраля 2024 г.

После переработки 17 марта 2024 г.

Принята к публикации 17 марта 2024 г.

Периферические мембранные белки временно связываются с поверхностью мембраны, заглубляясь в липидный слой. В этой работе мы показываем, что в зоне контакта периферических мембранных белков с мембраной уменьшается доля транс-конфигураций двугранных углов в гидрофобных цепях липидов. При этом, для разных цепей липида и для двугранных углов, находящихся на разном расстоянии от начала цепи, этот эффект разный. Гош-конфигурация обладает большей энергией по сравнению с транс-конфигурацией. Поэтому снижение доли транс-конфигураций означает, что энергия цепи увеличивается. Для периферического мембранного белка, использованного в настоящей работе, энергия конформаций цепей повышается на  $\approx 2$  кДж/моль. Изменение конформаций цепей – часть молекулярных механизмов, которые лежат в основе модуля упругости мембран. Энергия, запасенная в виде конформированной цепи, может быть израсходована на десорбцию белка с поверхности мембраны и может рассматриваться как причина того, что взаимодействие периферических мембранных белков и мембраны является временным.

DOI: 10.31857/S1234567824080111, EDN: ZKNKBD

**1. Введение.** Периферические мембранные белки (ПМБ) временно связываются с поверхностью мембраны, заглубляясь в липидный слой, и способны переходить с поверхности мембраны в раствор и обратно. Важность изучения ПМБ объясняется тем, что многие представители этого семейства имеют фармакологическое значение. Это относится к фосфолипазам [1, 2], цитохрому С [3], липидпереносящим белкам [4, 5], липоксигеназам [6, 7] и ацетилхолинэстеразам [8–10].

Формирование комплекса ПМБ/мембрана является определяющим этапом функционирования этих белков [11]. Однако то, что связывание является временным, усложняет изучение формирующихся комплексов. Так зарекомендовавшие себя методы структурной биологии – ЯМР высокого разрешения [12] и криоэлектронная микроскопия [13] – хорошо работают для интегральных мембранных белков, но не для ПМБ. Поэтому информацию о взаимодействии ПМБ с мембраной приходится собирать с помощью комплекса экспериментальных подходов [14], методов масс-спектрологии [15], молекулярной динамики [16] и физических моделей [17, 18]. При этом ни один из методов не дает возможность собрать полную картину взаимодействия ПМБ с мембраной.

Вопрос о том, как при связывании с ПМБ изменяются на молекулярном уровне липиды мембраны, изучен недостаточно. В этой работе мы исследуем, как меняются конформации гидрофобных цепей липидов при связывании на поверхности мембраны периферического белка.

**2. Материалы и методы.** В качестве объектов исследования мы использовали липид пальмитоил-олеил-фосфатидилхолин (ПОФХ) и классический периферический мембранный белок – секреторную фосфолипазу A2<sup>2)</sup> (сФЛА2) [23]. Контактная с мембраной, сФЛА2 ведет себя, как все ПМБ – связывается с поверхностью с помощью сети ионных и водо-

<sup>2)</sup>сФЛА2 гидролизует липиды на поверхности биологической мембраны и селективно отщепляет жирную кислоту из второго положения (*sn-2*) фосфолипида. Участок белка, контактирующий с поверхностью мембраны, принято называть мембран-связывающим сайтом (в англоязычной литературе – *interfacial binding site*, IBS). Он отвечает за удержание фермента на поверхности мембраны. Мембран-связывающий участок формируется несколькими десятками аминокислот и варьируется от фермента к ферменту [19]. Участок белка, непосредственно выполняющий гидролиз липидной молекулы, называют каталитическим сайтом. Активность и селективность сФЛА2 определяется совместной работой участка IBS и каталитического сайта [20, 21]. В дополнение к IBS и каталитическому сайту недавно были обнаружены дополнительные участки белка, отвечающие за перемещение фермента по мембране [22].

<sup>1)</sup>e-mail: i\_boldyrev@mail.ru

родных связей и гидрофобных взаимодействий. Связывание приводит к вытеснению полярных головок фосфолипидов из области контакта с белком. Под молекулой белка образуется гидрофобное пятно, а бислоем в зоне контакта становится тоньше [24].

В этой работе данные получены с помощью моделирования молекулярной динамики взаимодействия белка сФЛА2 с бислоем их ПОФХ. Структуру белка получали из PDB (идентификатор PDB: 1ROC). Данные молекулярной динамики были верифицированы нами ранее экспериментально: 1) состояние мембраны коррелировало с данными флуоресцентной спектроскопии [24], 2) ориентация молекулы белка на поверхности мембраны коррелировала с данными атомно-силовой микроскопии [22]. Моделирование проводилось в два последовательных этапа: крупнозернистое (CG) и полноатомное моделирование.

На первом этапе расчеты проводились в программе Gromacs с использованием силового поля Martini 2.2 для белковой и стандартной липидной топологии [25]. Для сохранения структуры белка при создании его топологии использовалась схема резиновых связей [26]. Моделирование проводилось при 295 К. В расчетах использовались параметры, рекомендованные для расчета белково-мембранных систем с силовым полем Мартини 2.2 [27], а шаг интегрирования был уменьшен до 20 фс для получения корректных данных для динамики ароматических групп белка. Задачей первого этапа было получение МД модели белка, связанного на поверхности липидной мембраны.

На втором этапе поведение полученного связанного состояния исследовалось в полноатомном приближении. На втором этапе использовался пакет молекулярной динамики Gromacs [28] с параметрами силового поля Amber-14SB для белков [29], параметризацией липидных молекул Slipids [30] и моделью воды TIP3P [31]. Длительность траектории составила 500 нс. Ячейка моделирования содержала 450 молекул ПОФХ (225 молекул в одном слое) и одну молекулу сФЛА2.

В настоящей работе мы использовали концепцию множеств конформаций [32]. В этой концепции набор одинаковых молекул, в данном случае ПОФХ, разделяется на самостоятельные множества, каждое из которых характеризуется ключевой конформацией. Мы рассматриваем два множества. Одно состоит из молекул ПОФХ, контактирующих с белком. Второе состоит из молекул ПОФХ, не контактирующих с белком. Для каждой молекулы ПОФХ рассматриваются конформации гидрофобных цепей липидов, а

именно последовательности двугранных углов, которые могут принимать конфигурации транс или гош. Были рассчитаны все двугранные углы в ацильных цепях липидов для всех кадров на траектории МД. К транс конформации относили двугранные углы в диапазоне 150–210°. К гош конформации относили двугранные углы в диапазоне 30–90° (гош+) и 270–330° (гош-). Данные усредняли по всей траектории молекулярной динамики.

### 3. Результаты и обсуждение.

*3.1. Связывание сФЛА2 на поверхности мембраны.* Липидный бислой из ПОФХ с адсорбированной на нем молекулой фермента представлен на рис. 1. Это снимок траектории молекулярной динамики. Видно, что белок раздвигает в стороны полярные головки липидов. В результате в месте контакта на поверхности мембраны образуется гидрофобное пятно, экранированное от воды молекулой белка. Сайт IBS белка контактирует непосредственно с гидрофобными цепями липидов. В области контакта бислоем становится тоньше.

*3.2. Конформации гидрофобных цепей.* Молекулы липидов могут взаимодействовать или не взаимодействовать с белком. К первому – множеству  $I$  – относятся молекулы, непосредственно контактирующие с белком. Ко второму – множеству  $N$  – относятся молекулы, которые не контактируют с белком. Каждый элемент множества  $N$  или  $I$  – это индивидуальная конформация цепи.

Для фосфатидилхолинов, к которым относится ПОФХ, число возможных конформаций полярной головки невелико относительно числа конформаций гидрофобной цепи. Поэтому далее мы рассматриваем только изменения конформаций гидрофобной цепи. Гидрофобные цепи ПОФХ представляют собой остатки пальмитиновой и олеиновой кислот (рис. 2а). В первом – 13 двугранных углов. Во втором – 12 двугранных углов и двойная связь по середине цепи. Двугранные углы в гидрофобных цепях липидов могут принимать конфигурации гош-, гош+ и транс. Разница энергии между конфигурациями транс и гош составляет 2 кДж/моль [33].

Поскольку конфигурации транс, гош+ и гош- переходят друг в друга, то конфигурацию  $i$ -го двугранного угла в ансамбле цепей можно представить как долю  $f_i$  транс конфигурации.  $f_i$  – доля транс конфигураций  $i$ -го двугранного угла среди всех гидрофобных цепей во всем множестве молекул, количество двугранных углов в транс конфигурации, деленное на число молекул в множестве. Тогда множество всех конформаций молекул в множестве можно упрощенно представить как ключевую (среднюю) конформа-

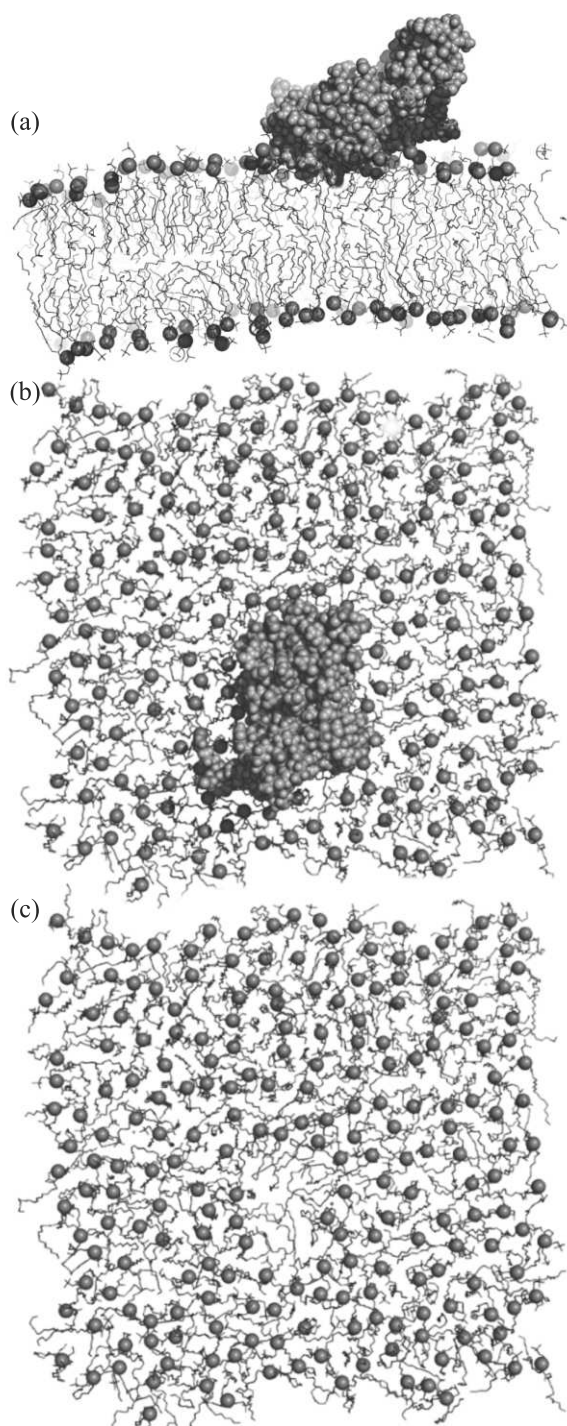


Рис. 1. (Цветной онлайн) Результаты молекулярной динамики: белок, адсорбированный на поверхности мембраны. (a) – Вид сбоку. (b) – Вид сверху. (c) – Вид сверху со скрытой молекулой белка. Белок выделен зеленым цветом. Молекулы липидов отрисованы черным. Атомы фосфора в молекулах липидов выделены оранжевым

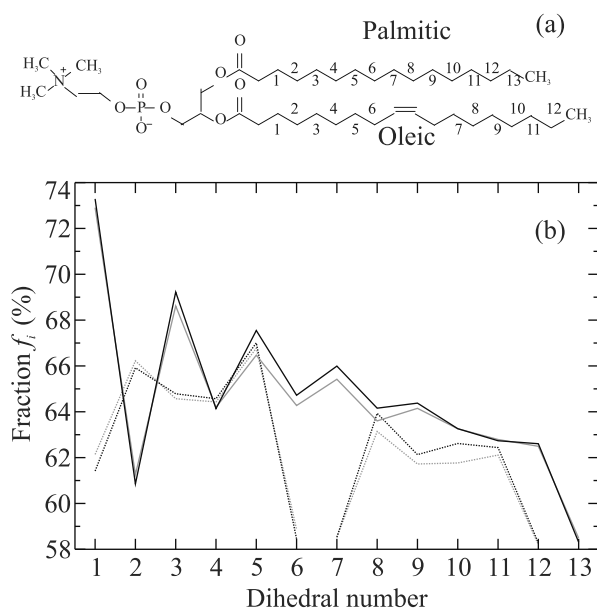


Рис. 2. (Цветной онлайн) (a) – Структура молекулы липида ПОФХ (пальмитоилолеилфосфатидилхолин) и нумерация двугранных углов в пальмитиновой и олеиновой цепях. (b) – Графическое представление ключевых конформаций – доля транс-конфигураций в пальмитиновой (сплошные линии) и олеиновой (пунктир) цепях липида. Черным цветом показана доля транс-конфигураций в цепях липидов, не контактирующих с белком – ключевая конформация  $N_k$ . Оранжевым – ключевая конформация  $I_k$ , липиды, контактирующие с белком

цию. Ключевая конформация представляет собой последовательность долей  $f_i$  для всех двугранных углов липидной цепи:

$$\begin{matrix} 1 & 2 & 3 & \dots & k \\ f_1 & f_2 & f_3 & \dots & f_k \end{matrix}$$

Каждое из множеств  $I$  и  $N$  мы представляем в виде ключевой конформации –  $I_k$  и  $N_k$  соответственно.

Энергию одной ключевой конформации можно определить по формуле:

$$E_{\text{conf}} = \sum_k (1 - f_i) * E_{t \rightarrow g}. \quad (1)$$

$E_{\text{conf}}$  представляет собой энергию одной гидрофобной цепи, усредненную по всему множеству  $N$  или  $I$ , а  $E_{t \rightarrow g}$  – энергия транс-гош перехода, оцениваемая в 2 кДж/Моль. Поскольку в молекуле ПОФХ две гидрофобных цепи, пальмитиновая и олеиновая, то общая энергия молекулы будет суммой энергий конформаций цепей:

$$E_{\text{mol}} = E_{\text{palm}} + E_{\text{ole}}. \quad (2)$$



Использование понятия ключевой конформации дает возможность сравнивать энергию липидов, находящихся в контакте с мембранным белком и не контактирующих с ним.

Разница энергии между молекулой, находящейся в области контакта, и вне ее равна:

$$\Delta E = E_{\text{mol } N} - E_{\text{mol } I} \quad (3)$$

Ключевые конформации для пальмитиновой и олеиновой цепей ПОФХ в мембране, контактирующей с белком, представлены на рис. 2.

Видно, что в зоне контакта уменьшается доля транс конфигураций. При этом для разных цепей и разных двугранных углов эффекты различны. Для пальмитинового остатка сильнее всего доля транс конфигураций снижается посередине цепи – в диапазоне от 5-го до 9-го двугранного угла. В начале цепи (углы 1-4) и в конце цепи (углы 12-13) доля транс конфигураций не зависит от присутствия белка. Для олеинового остатка картина в целом похожа – доля транс конфигураций снижается для цепей липидов, находящихся в контакте с белком. Однако характер изменений отличается – наибольшее уменьшение доли транс конфигураций наблюдается в диапазоне от 8 до 11-го двугранного угла.

Гош-конфигурация обладает большей энергией по сравнению с транс-конфигурацией. Снижение доли транс конфигураций, возрастание доли гош конфигураций, означает увеличение энергии цепи. Данные на рис. 2 говорят о возрастании доли транс конфигурации вплоть до 2% в сегменте цепи.

Рассчитанные энергии конформаций цепей и молекул в области контакта белка с мембраной и вне ее, а также  $\Delta E$  приведены в табл. 1.

**Таблица 1.** Энергия конформации цепей, кДж/моль

	<i>I</i>	<i>N</i>
$E_{\text{palm}}$	9.2255	9.1596
$E_{\text{ole}}$	9.0304	8.9987
$E_{\text{mol}}$	18.2559	18.1583
$\Delta E$		0.09765

Как видно из табл. 1, разница энергии между молекулой липида в области контакта белка с мембраной и вне ее составляет 0.0976 кДж/Моль. При этом энергия молекулы, находящейся в области контакта, оказывается выше. Таким образом, связывание белка приводит к появлению конформаций с увеличенной энергией. Значение  $\Delta E$  невелико. Однако в контакте с белком находится несколько липидов, поэтому для получения конформационного вклада в энергию взаимодействия нужно умножить  $\Delta E$  на число молекул

липидов, находящихся в контакте с белком. Последнее следует из траектории молекулярной динамики (рис. 3а).

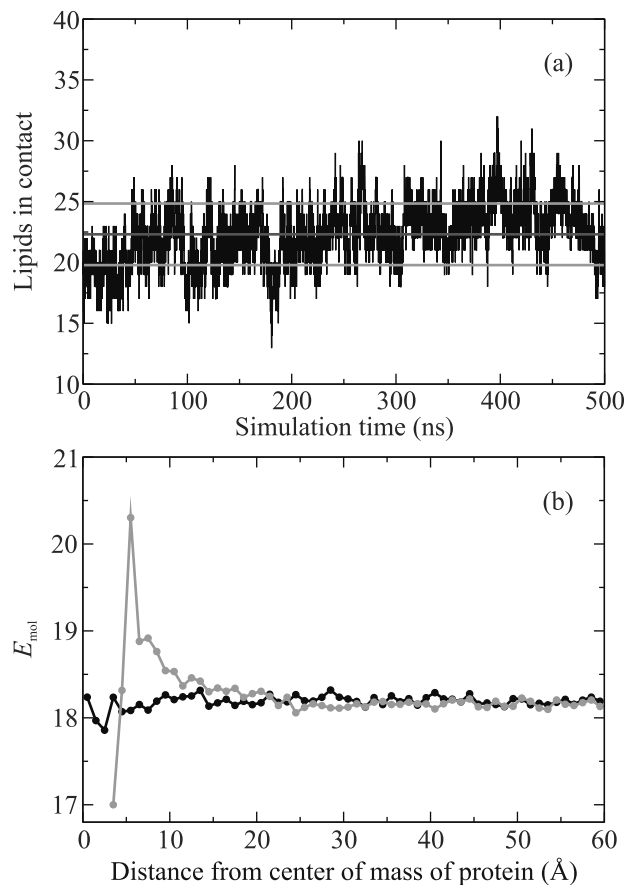


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Число молекул липидов, находящихся в контакте с молекулой белка по траектории молекулярной динамики. Черным цветом обозначено фактическое число молекул в данный момент времени. Красным – среднее значение по всей траектории, оранжевым – стандартное отклонение. (б) – Энергия молекулы в зависимости от расстояния от центра масс белка. Оранжевый – молекулы в монослое мембраны, контактирующем с белком. Черный – молекулы в противоположном от белка монослое

Из рисунка 3а видно, что число липидов, находящихся в контакте с белком, составляет  $22.3 \pm 2.5$  молекул. Это дает оценку конформационного вклада в энергию взаимодействия белка с мембраной в 1.9–2.4 кДж/Моль, т.е. величину, сопоставимую со значением  $k_B T$ .

Для оценки конформационного вклада в энергию взаимодействия мы использовали усреднение по всем липидам в множествах *I* и *N*. Однако энергия конформаций индивидуальной молекулы зависит от того, на каком расстоянии от белка находится эта мо-

лекула (рис. 3b). Рисунок 3b показывает, что в области контакта белка с мембраной энергия конформации молекулы липида заметно повышается. Одновременно в противоположном монослое, не контактирующим с белком, изменения энергии конформации практически не заметны. Эффект быстро затухает – уже на расстоянии 15 Å от центра белка энергии конформации молекул в обоих монослоях оказываются равными (рис. 3b).

Энергия изменения конформаций гидрофобных цепей – часть тех возмущений, которые белок вносит в мембрану. К другим возмущениям этого рода относятся изменение ориентации полярных головок, нарушение и образование ионных и водородных связей, перестройка дипольных контактов. В гидрофобных цепях взаимодействие с белком приводит к повышению доли гош конфигураций, а значит к увеличению энергии цепей. Связывание ПМБ с мембраной, которое в целом определяется гидрофобными и электростатическими взаимодействиями, энергетически выгодно. Поэтому энергия конформаций по знаку противоположна энергии взаимодействия белка с мембраной, т.е. на изменение конформаций необходимо затратить энергию. Фактически часть энергии взаимодействия ПМБ с мембраной расходуется на изменение конформаций цепей липидов. С теоретической точки зрения сопротивление мембраны описывается модулем упругости мембраны. Изменение конформаций цепей – часть молекулярных механизмов, которые лежат в основе модуля упругости мембран. С точки зрения молекулярной биологии запасенная в виде конформаций цепей энергия может расходоваться на десорбцию белка с поверхности мембраны и, таким образом, объясняет на молекулярном уровне, почему взаимодействие ПМБ с мембраной является временным.

**4. Заключение.** Гидрофобные цепи липидов способны принимать множество различных конформаций. Это их свойство определяет способность липидной мембраны адаптироваться к внешним воздействиям, таким как связывание периферических белков на ее поверхности. В ходе связывания ПМБ гидрофобные цепи липидов меняют свои конформации таким образом, что в зоне контакта белка с мембраной уменьшается доля транс-конфигураций двугранных углов. При этом энергия цепи увеличивается.

**Финансирование работы.** Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант # 21-75-00113.

**Конфликт интересов.** Авторы декларируют отсутствие конфликта интересов.

1. M. A. Frohman, Trends in pharmacological sciences **36**(3), 137 (2015).
2. N.D. Quach, R.D. Arnold, and B.S. Cummings, Biochemical pharmacology **90**(4), 338 (2014).
3. T. Eleftheriadis, G. Pissas, V. Liakopoulos, and I. Stefanidis, Frontiers in immunology **7**, 279 (2016).
4. J. Yang and M. S. Stack, Cancers **12**(11), 3469 (2020).
5. E. C. Quint ao and P. M. Cazita, Atherosclerosis **209**(1), 1 (2010).
6. H. Karatas and C. Cakir-Aktas, Archives of Neuropsychiatry **56**(4), 288 (2019).
7. K. van Leyen, *Lipoxygenase: an emerging target for stroke therapy, CNS & Neurological Disorders-Drug Targets (Formerly Current Drug Targets-CNS & Neurological Disorders)*, Bentham Science Publishers (2013), v.12(2), p.191; <https://www.ingentaconnect.com/content/ben/cnsnddt/2013/00000012/00000002/art00005>
8. U. Holzgrabe, P. Kapková, V. Alptüzün, J. Scheiber, and E. Kugelman, Expert Opin. Ther. Targets **11**(2), 161 (2007).
9. M. Singh, M. Kaur, H. Kukreja, R. Chugh, O. Silakari, and D. Singh, Eur. J. Med. Chem. **70**, 165 (2013).
10. R. Benfante, S. Di Lascio, S. Cardani, and D. Fornasari, Aging Clinical and Experimental Research **33**(4), 82 (2021).
11. A. Whited and A. Johs, Chemistry and Physics of Lipids **192**, 51 (2015).
12. M. Necelis, C. McDermott, M.B. Dufriane, C. Baryames, and L. Columbus, Current Opinion in Structural Biology **82**, 102654 (2023).
13. C. Thangaratnarajah, J. Rheinberger, and C. Paulino, Current Opinion in Structural Biology **76**, 102440 (2022).
14. W. Cho, L. Bittova, and R. V. Stahelin, Anal. Biochem. **296**(2), 153 (2001).
15. C. Sahin, D. J. Reid, M. T. Marty, and M. Landreh, Biochem. Soc. Trans. **48**(2), 547 (2020).
16. J. Guo, Y. Bao, M. Li, S. Li, L. Xi, P. Xin, L. Wu, H. Liu, and Y. Mu, Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Mol. Sci. **13**(6), e1679 (2023).
17. O. V. Kondrashov and S. A. Akimov, J. Chem. Phys. **157**(7), 074902 (2022).
18. O. V. Kondrashov and S. A. Akimov, Biomolecules **13**(12), 1731 (2023).
19. J. Winget, Y. Pan, and B. Bahnson, Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Molecular and Cell Biology of Lipids **1761**(11), 1260 (2006).
20. Алексеева and Болдырев, Биологические мембраны **37**(5), 323 (2020).
21. A. Alekseeva, A. Korotaeva, E. Samoilova, P. Volynsky, E. Vodovozova, and Biochem. Biophys. Res. Commun. **454**(1), 178 (2014).

22. N. Kuzmina, P. Volynsky, I. Boldyrev, and A. Alekseeva, *Toxins* **14**(10), 669 (2022).
23. E. Dennis, J. Cao, Y.-H. Hsu, V. Magrioti, and G. Kokotos, *Chemical reviews* **111**(10), 6130 (2011).
24. A. Alekseeva, P. Volynsky, N. Krylov, V. Chernikov, E. Vodovozova, and I. Boldyrev, *Biochim. Biophys. Acta* **1863**(1), 183481 (2021).
25. S. J. Marrink, H. J. Risselada, S. Yefimov, D. P. Tieleman, and A. H. De Vries, *J. Phys. Chem. B* **111**(27), 7812 (2007).
26. X. Periole, M. Cavalli, S.-J. Marrink, and M. A. Ceruso, *J. Chem. Theory Comput.* **5**(9), 2531 (2009).
27. D. H. De Jong, S. Baoukina, H. I. Ingólfsson, and S. J. Marrink, *Comput. Phys. Commun.* **199**, 1 (2016).
28. M. J. Abraham, T. Murtola, R. Schulz, S. Páll, J. C. Smith, B. Hess, and E. Lindahl, *SoftwareX* **1**, 19 (2015).
29. J. A. Maier, C. Martinez, K. Kasavajhala, L. Wickstrom, K. E. Hauser, and C. Simmerling, *J. Chem. Theory Comput.* **11**(8), 3696 (2015).
30. J. P. Jambeck and A. P. Lyubartsev, *J. Chem. Theory Comput.* **9**(1), 774 (2013).
31. W. L. Jorgensen, J. Chandrasekhar, J. D. Madura, R. W. Impey, and M. L. Klein, *J. Chem. Phys.* **79**(2), 926 (1983).
32. Болдырев, *Письма в ЖЭТФ* **119**(7), 546 (2024).
33. I. Kanosaka, R. G. Snyder, and H. L. Strauss, *J. Chem. Phys.* **84**(1), 395 (1986).

# Содержание

## Том 119, выпуск 7

### Поля, частицы, ядра

- Анохина А. К теории катастроф для гомологий Хованова–Рожанского ..... 475

### Астрофизика и космология

- Арбузова Е.В., Долгих К.А., Долгов А.Д., Калашёв О.Е., Корочкин А.А., Панасенко Л.А., Поздняков Н.А., Рубцов Г.И., Руденко А.С., Ткачёв И.И. Открытие новых окон в раннюю Вселенную с помощью многоканальной астрономии (Мини-обзор) ..... 481

### Оптика, лазерная физика

- Асеев С.А., Миронов Б.Н., Пойдашев Д.Г., Ищенко А.А., Рябов Е.А. “Аномальный” фотоэффект в методе сверхбыстрой электронной дифракции ..... 492

### Плазма, гидро- и газодинамика

- Новопашин С.А., Каляда В.В. Подавление нуклеации в турбулентном потоке газа ..... 498

- Гусаков Е.З., Попов А.Ю. О насыщении неустойчивости индуцированного рассеяния обыкновенной СВЧ волны в транспортном барьере токамака при электронном циклотронном нагреве плазмы ..... 502

### Конденсированное состояние

- Самохвалов А.В. Аномальный эффект Джозефсона в планарной гибридной структуре со спин-орбитальным взаимодействием ..... 508

- Ponosov Yu.S., Komleva E.V., Pankrushina E.A., Mikhailova D., Streltsov S.V. Raman spectroscopy of  $\text{Na}_3\text{Co}_2\text{SbO}_6$  ..... 516

- Сидельников М.С., Пальниченко А.В., Перваков К.С., Власенко В.А., Зверькова И.И., Успенская Л.С., Пудалов В.М., Винников Л.Я. Прямое наблюдение пиннинга вихрей Абрикосова в пространственно неоднородном кристалле  $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$  ..... 518

- Вяселев О.М., Гиппиус А.А., Случанко Н.Е., Шицевалова Н.Ю. Низкотемпературная кристаллизация дефектов структуры в  $\text{LuV}_{12}$  по данным ЯМР спектроскопии  $^{175}\text{Lu}$  ..... 524

### Методы теоретической физики

- Кудрявцев А.Г. О двукратном преобразовании Мутара стационарного уравнения Шредингера с осевой симметрией ..... 529

### Квантовая информатика

- Балыгин К.А., Кулик С.П., Молотков С.Н. Реализация квантового генератора случайных чисел: экстракция доказуемо случайных битовых последовательностей из коррелированных марковских цепочек ..... 533

**Биофизика**

**Болдырев И.А.** Конформационное разнообразие липидов ..... 545

**Сараева И.Н., Римская Е.Н., Тимурзиева А.Б., Горевой А.В., Шельгина С.Н., Попадюк В.И., Переведенцева Е.В., Кудряшов С.И.** Обработка спектров комбинационного рассеяния света новообразований кожи методом лоренцевой аппроксимации: пилотные исследования ..... 552

**Дискуссия**

**Volovik G.E.** De Sitter local thermodynamics in  $f(R)$  gravity ..... 560

**Содержание**  
**Том 119, выпуск 8**  
**Оптика, лазерная физика**

**Григорьев К.С., Кузнецов Н.Ю., Макаров В.А.** Ленты эллипсов поляризации в непараксиальных оптических полях (Мини-обзор) ..... 565

**Рубан В.П.** Столкновения световых пучков разной круговой поляризации ..... 579

**Мурзаханов Ф.Ф., Садовникова М.А., Мамин Г.В., Шуртакова Д.В., Мохов Е.Н., Казарова О.П., Гафуров М.Р.** Оптическая спиновая инициализация азот-вакансионных центров в изотопно-обогащенном ( $^{28}\text{Si}$ ) кристалле  $6\text{H-SiC}$  для квантовых технологий ..... 587

**Пушкарев Д.В., Селезнев Л.В., Ризаев Г.Э., Урюпина Д.С., Жидовцев Н.А., Косарева О.Г., Савельев А.Б.** Формирование О-образной структуры в красном крыле частотно-углового спектра при филаментации на протяженной атмосферной трассе ..... 593

**Конденсированное состояние**

**Чумаков Н.К., Андреев А.А., Белов И.В., Давыдов А.Б., Езубченко И.С., Лев Л.Л., Моргун Л.А., Николаев С.Н., Черных И.А., Шабанов С.Ю., Строков В.Н., Валеев В.Г.** Магнетосопротивление и симметрия двумерного электронного газа гетероструктур  $\text{AlGaIn}/\text{AlN}/\text{GaIn}$  ..... 598

**Polyak V.A., Khrapai V.S., Tikhonov E.S.** What can we learn from nonequilibrium response of a strange metal? ..... 604

**Беляев М.А., Зубарев Н.М., Зубарева О.В.** Конические структуры на поверхности жидкости в электрическом поле: влияние объемного и поверхностного зарядов ..... 606

**Avakyants A.A., Orlova N.N., Timonina A.V., Kolesnikov N.N., Deviatov E.V.** Surface spin polarization in the magnetic response of  $\text{GeTe}$  Rashba ferroelectric ..... 614

**Карелина Л.Н., Шуравин Н.С., Егоров С.В., Больгинов В.В., Рязанов В.В.** Магнитные переключения FSF-мостиков при низких температурах ..... 616

**Lebed A.G.** Theory of Lee–Naughton–Lebed’s oscillations in moderately strong electric fields in layered quasi-one-dimensional conductors ..... 622

**Биофизика**

**Волынский П.Е., Алексеева А.С., Болдырев И.А.** Влияние липидных конформаций на энергию взаимодействия мембраны и периферического белка ..... 624