



Письма
в
ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
и
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ
ФИЗИКИ

www.sciencejournals.ru



РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

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

том 118

Выпуск 5

10 сентября 2023

*Журнал издается под руководством
Отделения физических наук РАН*

Главный редактор В. М. Пудалов

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

Зав. редакцией *И. В. Подыниглазова*

Адрес редакции 119334 Москва, ул. Косыгина 2

тел./факс (499)-137-75-89

e-mail letters@kapitza.ras.ru

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

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

Генерация длинноволнового стимулированного излучения в квантовых ямах HgCdTe с увеличенным энергетическим порогом оже-рекомбинации

К. А. Мажукина^{+*1)}, В. В. Румянцев⁺, А. А. Дубинов^{+,*}, В. В. Уточкин⁺, А. А. Разова⁺, М. А. Фадеев⁺,
К. Е. Спирин[×], М. С. Жолудев^{+,*}, Н. Н. Михайлов[°], С. А. Дворецкий[°], В. И. Гавриленко^{+,*}, С. В. Морозов^{+,*}

⁺Институт физики микроструктур РАН, 603087 Нижний Новгород, Россия

^{*}Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского,
603950 Нижний Новгород, Россия

[×]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

[°]Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 19 июля 2023 г.

После переработки 30 июля 2023 г.

Принята к публикации 31 июля 2023 г.

В работе исследовались различные дизайны диэлектрических волноводов для получения стимулированного излучения (СИ) в диапазоне длин волн 15–30 мкм из гетероструктур с квантовыми ямами (КЯ) на основе CdHgTe, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии. Снижение радиационных потерь в оптимизированных структурах позволило снизить пороговую интенсивность возникновения СИ до значений $\sim 100 \text{ Вт/см}^2$. Модернизация технологии роста привела к уменьшению остаточной концентрации кадмия в КЯ HgCdTe до 2.5 %, благодаря чему удалось увеличить пороговую энергию оже-рекомбинации и добиться предельной температуры наблюдения СИ на межзонных переходах выше 100 К. Полученные результаты создают предпосылки для реализации источников когерентного излучения, превосходящих по характеристикам используемые в спектральном диапазоне 15–30 мкм лазеры на основе халькогенидов свинца–олова.

DOI: 10.31857/S1234567823170019 EDN: jyzuax

В настоящее время наиболее распространенными из компактных источников когерентного излучения в длинноволновой части среднего и дальнем инфракрасном (ИК) диапазоне являются квантово-каскадные лазеры (ККЛ) на основе полупроводников $A^{III}B^V$ [1]. Практическая потребность в подобных когерентных источниках во многом связана с актуальными задачами спектроскопии и анализа сложных соединений, в том числе органических [2], представляющих большой интерес в области биоинженерии, мониторинга окружающей среды, фундаментальных исследований и пр [3–6]. В то же время существует широкий диапазон длин волн (20–60 мкм), в котором ККЛ на основе $A^{III}B^V$ не работают вследствие сильного фононного поглощения в этих полупроводниках [1].

Альтернативным источником излучения в дальнем ИК диапазоне являются межзонные лазеры на основе халькогенидов свинца–олова PbSnSe(Te). В

лазерах этого типа получено излучение в диапазоне длин волн 20–50 мкм [7, 8] при токовой накачке, однако максимальная температура генерации в этом диапазоне практически не превосходит температуры жидкого азота [9]. Создание гетероструктур с квантовыми ямами (КЯ) на основе PbSnSe(Te) осложняется из-за сильного рассогласования постоянных решетки халькогенидов свинца и халькогенидов олова и высокой остаточной концентрацией дефектов [10].

Другой известной системой, в которой фононное поглощение сдвинуто относительно $A^{III}B^V$ материалов в длинноволновую область спектра, являются твердые растворы кадмий–ртуть–теллур (CdHgTe) [11]. Возможность использования гетероструктур с КЯ на основе HgCdTe в качестве активной среды длинноволновых лазеров рассматривалась в теоретических работах [12, 13]. На протяжении последних десятилетий достигнут значительный прогресс в технологии молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) твердых растворов HgCdTe с прецизионным контролем состава и толщины слоев вплоть до монослоя, в свя-

¹⁾e-mail: mazhukina@ipmras.ru

Таблица 1. Параметры исследуемых структур

Образец #	Подложка	$D_{\text{buf}}, \mu\text{m}$	$D_1, \mu\text{m}$	$D, \mu\text{m}$	$D_2, \mu\text{m}$	x_{wg}	N_{QW}	d_{QW}, nm	x_{QW}
#1	<i>i</i> -GaAs	15	4.0	0.6	5.0	0.64–0.66	15	7.8	0.074
#2	n^{++} -GaAs	10	1.8	0.6	3.0	0.62–0.64	20	6.5	0.062
#3	n^{++} -GaAs	10	2.5	0.5	4.0	0.61–0.65	20	5.4	0.026
#4	<i>i</i> -GaAs	15	4.1	0.7	5.1	0.63–0.65	21	4.9	0.025
#5	n^{++} -GaAs	10	2.6	0.6	3.8	0.61–0.63	20	5.2	0.028

зи с чем наблюдается рост числа исследований узкозонных гетероструктур с квантовыми ямами (КЯ) на его основе [14, 15]. В недавних работах [16, 17] в таких структурах удалось получить генерацию на межзонных переходах в диапазоне температур 8–70 К при оптической накачке, а максимальная длина волны (при 8 К) составила 31 мкм, что лежит за пределами диапазона, доступного для существующих ККЛ.

Цель настоящей работы – исследование пороговой плотности мощности накачки и максимальной температуры, при которых возможна генерация на межзонных переходах в гетероструктурах с КЯ HgTe/CdHgTe в контексте сравнения с существующими лазерами на основе халькогенидов свинцолова.

Все исследованные структуры были выращены методом МЛЭ на GaAs-подложке с буферными слоями ZnTe (толщиной 50 нм) и CdTe (D_{buf} , толщиной от 10 до 15 мкм) с *in situ* эллипсометрическим контролем состава и толщины слоев [18]. В качестве активной области структуры содержали массив из N_{QW} узких КЯ (толщиной d_{QW}) с небольшим остаточным содержанием Cd (x_{QW}) [19], встроенных в волноводный слой (толщины D_1, D_2) с концентрацией кадмия x_{wg} (табл. 1) таким образом, чтобы пучность TE_0 -моды локализовывалась в пространстве, содержащем слой с КЯ (рис. 1). Совокупная толщина активной области (общая толщина квантовых ям и барьеров, их разделяющих) обозначена D . Параметры слоев планарного диэлектрического волновода приведены в табл. 1, и более подробно будут рассмотрены ниже.

Образцы $5 \times 5 \text{ мм}^2$ устанавливались на холодный палец оптического криостата замкнутого цикла с доступным диапазоном температур от 8 до 300 К, с входным окном на основе ZnSe и выходным окном на основе КРС-5. Оптическое возбуждение структур обеспечивалось импульсным CO_2 -лазером с рабочей длиной волны 10.6 мкм, энергией в импульсе до 40 мДж, длительностью импульса ~ 100 нс и частотой повторения импульсов до 50 Гц. Излучение от образцов при помощи эллиптического зеркала заводилось в ИК фурье-спектрометр Bruker Vertex 80v,

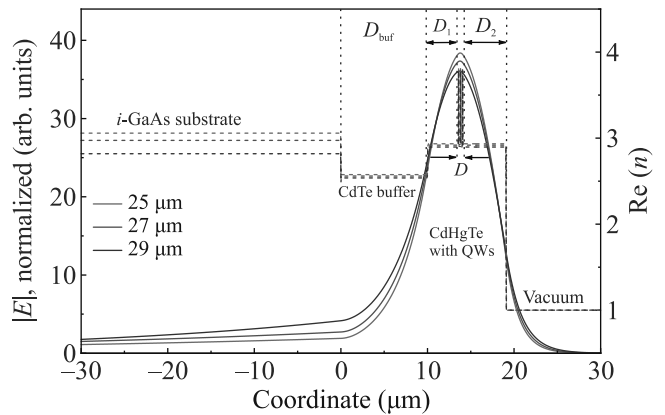


Рис. 1. (Цветной онлайн) Типичный дизайн волноводных гетероструктур на основе CdHgTe с множественными КЯ, помещенными в пучность TE_0 -моды. Параметры исследуемых структур, отмеченные на рисунке, приведены в табл. 1. Расчетное распределение поля моды для длин волн 25–29 мкм (левая вертикальная ось) показано сплошными линиями, пунктирными линиями обозначено распределение реальной части показателя преломления (правая вертикальная ось)

работавший в режиме пошагового сканирования. В качестве детекторов использовались фотосопротивления на основе HgCdTe (с красной границей 24 мкм) и кремниевый болометр (диапазон волновых чисел 10–700 см^{-1}).

Идентификация спектров стимулированного излучения (СИ) производилась по характерным признакам: ширине линии излучения (рис. 2а) и “пороговому” сверхлинейному росту интегрального сигнала от мощности накачки (рис. 2б). Полная ширина на полувысоте (FWHM) линии СИ составляла 1.5 мэВ и не менялась с температурой. Данная величина существенно меньше минимальной ширины спектра для спонтанного излучения ($0.7kT$ для случая квантовой ямы с параболическим законом дисперсии) даже в предположении нулевого неоднородного уширения, хотя величина размытия красной границы межзонных переходов в подобных структурах, как правило, составляет единицы мэВ [19].

Условием развития СИ в образце является равенство величины усиления общим потерям в структуре,

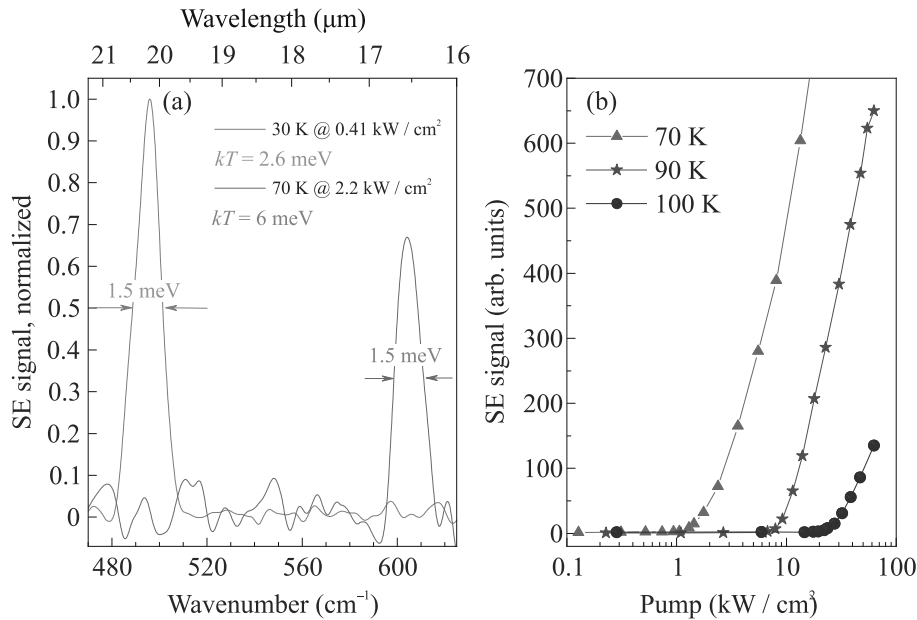


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Спектры СИ структуры # 5 при $T = 30$ и 70 К. (б) – Зависимость сигнала СИ структуры # 5 от интенсивности лазера накачки при различных температурах

что выражается соотношением: $(G - \alpha_a)\Gamma = \alpha_p + \alpha_m$ [20], где G – коэффициент усиления активной среды, α_a – коэффициент потерь в активной среде, Γ – фактор оптического ограничения, α_p и α_m – коэффициенты поглощения в пассивных слоях и потерь на вывод излучения соответственно. В данной работе исследуются макроскопические образцы, поэтому потерями α_m можно пренебречь. Наибольшую роль играет соотношение α/Γ (коэффициента поглощения в пассивных слоях (α_p) и фактора оптического ограничения (Γ)). Γ -фактор – это доля электромагнитного излучения в активной области. По порядку величины Γ -фактор можно оценить, как отношение совокупной толщины квантовых ям ($N_{QW} \times d_{QW}$) к толщине волноводного слоя $D_1 + D_2$, что дает оценку ~ 0.01 . Строгое выражение для Γ -фактора можно найти в книге [20]. При выполнении условия $n_{GaAs} \geq n_{CdTe}$ (показатель преломления GaAs-подложки превышает показатель преломления буферного слоя CdTe), наблюдается значительный рост параметра α/Γ , возникающий из-за “вытекания” моды в подложку (рис. 1) [17]. Расчет зависимости модуля электрического поля для разных длин волн (25, 27, 29 мкм) проводился для фиксированной энергии электромагнитного поля в TE_0 -моды, поэтому увеличение $|E|$ в подложке с ростом длины волны сопровождается его уменьшением в активной области. Если рассматривать Γ -фактор как функцию длины волны, то из-за уменьшения амплитуды электромагнитного поля в области КЯ с ростом длины волны Γ -фактор уменьшается.

Для подавления этого эффекта были апробированы два типа оптимизации дизайна диэлектрических волноводов: увеличение толщины буферного слоя CdTe и рост структур на n^{++} -GaAs подложке.

Ранее рост структур на утолщенном буфере CdTe (15 мкм) позволил получить СИ с длиной волны 27 мкм при температуре 8 К [17], что соответствует максимуму потерь в структуре со стандартной толщиной буфера 10 мкм (рис. 3). Однако увеличение толщины буферного слоя приводит к значительному увеличению времени роста структур из-за резкого увеличения их общей толщины. Поэтому в качестве альтернативы были исследованы структуры, выращенные на n^{++} -GaAs подложке. Подложка с концентрацией свободных носителей $n \sim 10^{17} - 10^{18} \text{ см}^{-3}$ обладает высоким коэффициентом отражения в дальнем ИК диапазоне, что позволяет улучшить локализацию TE_0 -моды, при этом сохранив общую толщину структуры менее ~ 15 мкм.

На рисунке 3 линиями представлена зависимость модовых потерь, деленных на фактор оптического ограничения, для структур из предыдущих работ [16, 17] и для структур, выращенных на утолщенном CdTe буфере и легированной GaAs-подложке. Удобство величины α/Γ состоит в том, что она соответствует значению материального усиления в КЯ, при котором становится возможным возникновение СИ. Символами представлена пороговая плотность мощности накачки для исследуемых структур. Видно, что оба варианта оптимизации структур приво-

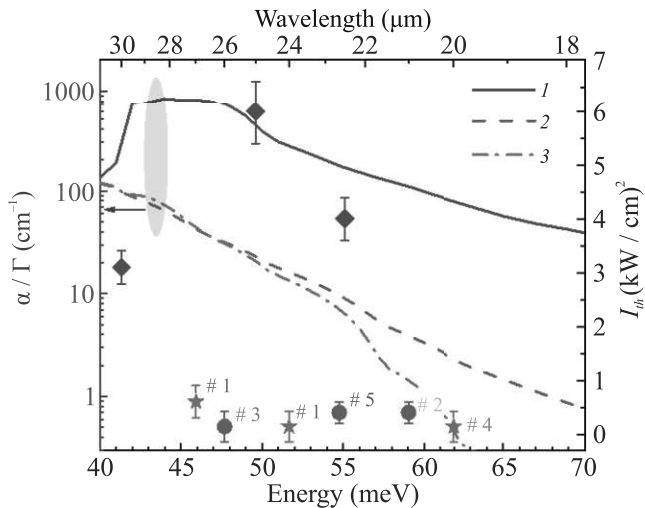


Рис. 3. (Цветной онлайн) Линии показывают результаты расчетов модовых потерь, деленных на коэффициент оптического ограничения для волноводных структур, выращенных на: 1 – i -GaAs подложке с толщиной CdTe буфера 10 мкм (структур S1 и S2 из работы [17] и B0225 из работы [19]); 2 – n^{++} -GaAs подложке с толщиной CdTe буфера 10 мкм; 3 – i -GaAs подложке с толщиной CdTe буфера 15 мкм. Символы показывают пороговую плотность мощности накачки возникновения СИ для структур S1, S2 из работы [17] и B0225 из работы [19] (ромбы, правая вертикальная ось) и структур, исследуемых в данной работе, при $T = 8\text{--}10\text{ K}$ (прочие символы, правая вертикальная ось). Для структуры #1 показаны характеристики 2 образцов, выколотых с разных сторон пластины

дят к значительному снижению радиационных потерь. При этом дизайн с расположением активной области на легированной подложке позволяет сократить совокупную толщину структуры до 15 мкм, в то время как при увеличенной толщине буфера она составляет около 25 мкм. Несмотря на несколько большие значения параметра α/Γ в диапазоне 25–17 мкм в структурах, выращенных на n^{++} -GaAs подложке, по сравнению со структурами с увеличенной толщиной буфера CdTe, и в том, и в другом случае, оптимизация волноводного слоя позволила снизить пороговую интенсивность возникновения СИ более чем на порядок до значений $\sim 100\text{ Вт/см}^2$ при 8 K.

Непосредственное сравнение пороговой плотности накачки для исследуемых структур и инжекционных лазеров на основе халькогенидов свинца-олова затруднено из-за различных механизмов накачки. Простая методика пересчета эквивалентной плотности тока из известной интенсивности оптической накачки для предлагаемых лазерных структур на основе HgCdTe дает значения в диапазоне десятков А/см^2 , в то время как в интересующем нас диапа-

зоне длин волн пороговая плотность тока лазеров на основе PbSnSe составляет $200\text{--}1000\text{ А/см}^2$ [9]. Однако поскольку в структурах с токовой накачкой должны присутствовать легированные слои, которые ведут к дополнительным потерям на свободных носителях, а также не удастся избежать существенного разогрева неравновесных электронов и дырок при их инжекции из барьеров, ожидаемые значения пороговой плотности тока в реальных структурах на порядок выше [21], и таким образом находятся на одном уровне с лазерами на основе халькогенидов свинца-олова.

С ростом температуры линия СИ сдвигается в коротковолновый диапазон из-за уменьшения ширины запрещенной зоны. Из рисунка 3 видно, что с уменьшением длины волны потери падают до пренебрежимо малых величин ($< 10\text{ см}^{-1}$). Поэтому при высоких температурах основное влияние на возникновение генерации оказывает оже-рекомбинация, приводящая к разогреву носителей, который ограничивает возможность усиления на межзонных переходах. Особенностью зонного спектра исследуемых структур является участок квазигиперболического закона дисперсии в окрестности точки $k = 0\text{ нм}^{-1}$, подавляющего оже-рекомбинацию [16]. Однако вдали от центра зоны Бриллюэна в первой валентной подзоне возникают отклонения от гиперболического закона дисперсии в виде боковых максимумов с высокой плотностью состояний (рис. 4а). Положение боковых максимумов фактически определяет пороговую энергию оже-рекомбинации (E_{th}), т.е. минимальную суммарную кинетическую энергию начальной системы трех частиц, требуемую для выполнения законов сохранения энергии и квазиимпульса при оже-процессе.

Как показывают расчеты, увеличение E_{th} достигается путем уменьшения ширины и концентрации кадмия в КЯ. До недавнего времени снижение кадмия менее 6.5 % [19] было недоступно в используемой технологии МЛЭ из-за специфических “кольцевых” источников кадмия. В работе [22] была теоретически исследована вероятность оже-рекомбинации в квантовых ямах CdHgTe с различной долей Cd при различных концентрациях неравновесных носителей. Расчеты предсказывали, что увеличение пороговой энергии оже-рекомбинации при малой доле кадмия (0–3 %) не приведет к сильному снижению темпа оже-рекомбинации для релевантного диапазона концентраций неравновесных носителей $n \sim 6 \cdot 10^{10} - 2 \cdot 10^{11}\text{ см}^{-2}$. Максимальное подавление оже-процесса предсказывалось для КЯ с концентрацией кадмия $\sim 6\%$ и связывалось с сильным экранированием кулоновского взаимодействия “тяжелыми” свободными носителями заряда в боковых

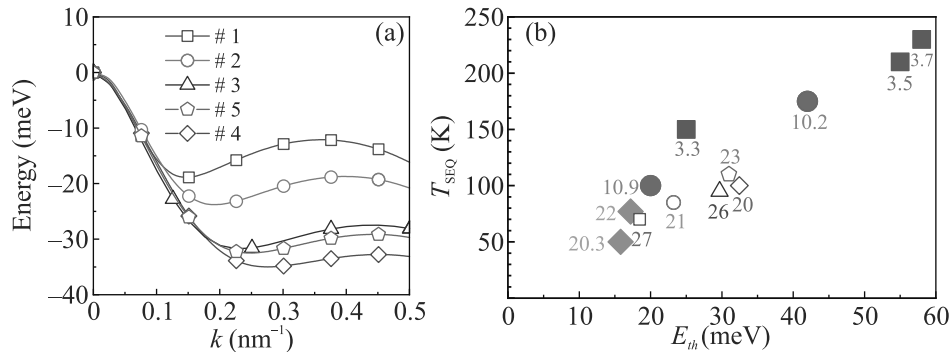


Рис. 4. (Цветной онлайн) (а) – Рассчитанный энергетический спектр первой валентной подзоны размерного квантования для КЯ HgCdTe в исследуемых структурах. Расчет выполнен в рамках модели Берта–Форемана с гамильтонианом Кейна 8×8 . (б) – Зависимость температуры гашения СИ T_{SEQ} от пороговой энергии оже-рекомбинации E_{th} . Подписи символов отражают максимальную длину волны СИ, полученную из структуры при температуре 8–10 K

максимумах первой валентной подзоны. Отметим, что данный результат был получен в рамках классического подхода (без использования приближения случайных фаз), который может приводить к завышению эффективности экранировки [22] и таким образом, нуждается в экспериментальной проверке.

В настоящей работе благодаря модернизации источника кадмия удалось достичь концентрации Cd в КЯ 2.5–2.8 %, что привело к увеличению пороговой энергии оже-рекомбинации практически в 2 раза. Для иллюстрации влияния пороговой энергии оже-рекомбинации на максимальную температуру генерации на межзонных переходах была построена зависимость температуры гашения СИ T_{SEQ} от E_{th} (рис. 4б).

Видно, что точки, соответствующие исследуемым структурам, в целом согласуются с трендом, обнаруженным ранее [16]: максимальная температура СИ, при которой возможна генерация на межзонных переходах, растет с увеличением пороговой энергии оже-рекомбинации. Эмпирически данный тренд можно описать зависимостью $T_{\text{SEQ}} \sim c \cdot E_{th}$, где коэффициент c от 3 до 4 K/мэВ. Иными словами, температура, при которой происходит активация оже-процесса, приводящего к разогреву носителей и гашению СИ, растет с уменьшением концентрации кадмия в КЯ из-за того, что неравновесные носители достигают боковых максимумов, в которых оже-рекомбинация не запрещена законами сохранения, при более высоких температурах. Таким образом, влияние пороговой энергии на темп оже-рекомбинации преобладает над увеличением эффективности экранирования кулоновского взаимодействия “тяжелыми” дырками в боковых максимумах, в том числе в КЯ с концентрацией Cd менее 6.5 %.

Определяющая роль пороговой энергии оже-рекомбинации подтверждается и при низких температурах решетки. В этом случае температура носителей зависит от условий накачки и может лежать в диапазоне от равновесной до сотен кельвинов. В работе [23] даже при температуре решетки 8 K при увеличении мощности накачки с энергией кванта 600 мэВ вскоре после порога возникновения усиления в структуре наступало полное гашение СИ за счет разогрева носителей из-за оже-рекомбинации. В оптимизированных структурах в аналогичных условиях интенсивность СИ не уменьшается до нуля, а выходит на насыщение, что является дополнительным подтверждением уменьшения эффективности оже-процессов и их влияния на разогрев носителей и гашение СИ, из-за повышения пороговой энергии E_{th} .

Таким образом, в данной работе продемонстрировано, что увеличение пороговой энергии оже-рекомбинации способствует росту максимальной температуры, при которой возможна генерация на межзонных переходах, и снижает неблагоприятное влияние разогрева носителей при большой разнице в энергии квантов накачки и СИ. В лучших из исследуемых структур доля Cd в КЯ была снижена до ~2.5 %, благодаря чему удалось достичь температур около 100 K, что превышает аналогичные показатели для лазеров на основе халькогенидов свинца-олова. Так как не было обнаружено существенного влияния экранировки кулоновского взаимодействия при оже-рекомбинации, в чистых КЯ HgTe/CdHgTe можно ожидать дальнейшего увеличения рабочей температуры. Как увеличение толщины буфера CdTe до 15 мкм, так и рост структур на n^{++} -GaAs подложке, позволили снизить пороговую интенсивность возникновения СИ более чем на порядок до

значений $\sim 1 \text{ кВт/см}^2$ при 77 К. При этом дизайн с расположением активной области на легированной подложке более предпочтителен, так как позволяет сократить совокупную толщину структуры до 15 мкм, в то время как при увеличенной толщине буфера она составляет около 25 мкм, что важно с точки зрения эффективности технологического процесса. Таким образом, полученные результаты открывают возможность создания лазеров дальнего ИК диапазона с рабочей температурой выше температуры кипения азота.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (грант # 075-15-2020-797 (13.1902.21.0024)).

1. M. S. Vitiello, G. Scalari, B. Williams, and P. De Natale, *Opt. Express* **23**, 5167 (2015).
2. R. J. Falconer and A. G. Markelz, *J. Infrared Millim. Terahertz Waves* **33**, 973 (2012).
3. O. Pirali, N.-T. Van-Oanh, P. Parneix, M. Vervloet, and P. Brechignac, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **8**(32), 3707 (2006).
4. K. H. Michaelian, Q. Wen, B. E. Billingham, J. M. Shaw, and V. Lastovka, *Vib. Spectrosc.* **58**, 50 (2012).
5. F. Cataldo, D. A. Garcia-Hernandez, and A. Manchado, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **429**(4), 3025 (2013).
6. M. Lamperti, R. Gotti, D. Gatti, M. K. Shakfa, E. Cane, F. Tamassia, P. Schunemann, P. Laporta, A. Farooq, and M. Marangoni, *Commun. Phys.* **3**(1), 1 (2020).
7. Л. Н. Курбатов, А. Д. Бритов, С. М. Караваев, С. Д. Сиваченко, С. Н. Максимовский, И. И. Овчинников, М. М. Рзаев, П. М. Старик, *Письма в ЖЭТФ* **37**(9), 422 (1983).
8. К. В. Маремьянин, А. В. Иконников, Л. С. Бовкун, В. В. Румянцев, Е. Г. Чижевский, И. И. Засавицкий, В. И. Гавриленко, *Физика и техника полупроводников* **52**(12), 1486 (2018).
9. К. В. Маремьянин, А. В. Иконников, А. В. Антонов, В. В. Румянцев, С. В. Морозов, Л. С. Бовкун, К. Р. Умбеталиева, Е. Г. Чижевский, И. И. Засавицкий, В. И. Гавриленко, *Физика и техника полупроводников* **49**(12), 1672 (2015).
10. A. R. Adams, C. T. Elliott, A. Krier, B. N. Murdin, and M. Tacke, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **359**, 547 (2001).
11. D. N. Talwar and M. Vandevyver, *J. Appl. Phys.* **56**(6), 1601 (1984).
12. V. M. Menon, L. R. Ram-Mohan, I. Vurgaftman, and J. R. Meyer, *J. Electron. Mater.* **29**(6), 865 (2000).
13. I. Vurgaftman and J. R. Meyer, *Opt. Express* **2**(4), 137 (1998).
14. L. Lunczer, P. Leubner, M. Endres, V. L. Müller, C. Brüne, H. Buhmann, and L. W. Molenkamp, *Phys. Rev. Lett.* **123**(4), 47701 (2019).
15. S. Gebert, C. Consejo, S. S. Krishtopenko et al. (Collaboration), *Nat. Photonics* **17**(3), 244 (2023).
16. S. V. Morozov, V. V. Rumyantsev, M. S. Zholudev, A. A. Dubinov, V. Ya. Aleshkin, V. V. Utochkin, M. A. Fadeev, K. E. Kudryavtsev, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretzskii, V. I. Gavrilenko, and F. Teppe, *ACS Photonics* **8**, 3526 (2021).
17. V. V. Rumyantsev, A. A. Dubinov, V. V. Utochkin, M. A. Fadeev, V. Ya. Aleshkin, A. A. Razova, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretzskii, V. I. Gavrilenko, and S. V. Morozov, *Appl. Phys. Lett.* **121**, 182103 (2022).
18. V. A. Shvets, N. N. Mikhailov, D. G. Ikusov, I. N. Uzhakov, and S. A. Dvoretzskii, *Opt. Spectrosc.* **127**(2), 34 (2019).
19. V. V. Rumyantsev, A. A. Razova, L. S. Bovkun et al. (Collaboration), *Nanomaterials* **11**, 1855 (2021).
20. H. C. Casey and M. B. Panich, *Heterostructure lasers*, Academic Press, N.Y. (1978).
21. A. Afonenko, D. Ushakov, G. Alymov, A. Dubinov, S. Morozov, V. Gavrilenko, and D. Svintsov, *Journal of Physics D: Applied Physics* **54**(17), 175108 (2021).
22. V. Ya. Aleshkin, V. V. Rumyantsev, K. E. Kudryavtsev, A. A. Dubinov, V. V. Utochkin, M. A. Fadeev, G. Alymov, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretzskii, F. Teppe, V. I. Gavrilenko, and S. V. Morozov, *J. Appl. Phys.* **129**, 133106 (2021).
23. В. В. Румянцев, Н. С. Куликов, А. М. Кадыков, М. А. Фадеев, А. В. Иконников, А. С. Казаков, М. С. Жолудев, В. Я. Алешкин, В. В. Уточкин, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий, С. В. Морозов, В. И. Гавриленко, *Физика и техника полупроводников* **52**(11), 1263 (2018).

Поляризационная динамика узких спектральных мод волоконного ВКР-лазера со случайной распределенной обратной связью

И. Д. Ватник, О. А. Горбунов¹⁾, Д. В. Чуркин

Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 5 июля 2023 г.

После переработки 31 июля 2023 г.

Принята к публикации 1 августа 2023 г.

В работе представлены результаты экспериментального исследования поляризационных свойств узких спектральных мод, возникающих в волоконном ВКР-лазере со случайной распределенной обратной связью за счет рэлеевского рассеяния вблизи порога генерации. Показано, что моды обладают высокой степенью поляризации, при этом состояния поляризации одновременно возникающих мод слабо коррелированы.

DOI: 10.31857/S1234567823170020, EDN: jzfsu

Лазеры с распределенной обратной связью, в которых отражательный элемент не локализован, а распределен в пространстве случайным образом, получили название случайных лазеров. Впервые лазерная генерация с обратной связью подобного типа была продемонстрирована для рубинового лазера [1], и в дальнейшем наблюдалась во всех основных типах лазеров, в частности, лазерах на красителях [2], полупроводниковых [3], твердотельных [4], волоконных [5] лазерах. Роль рассеяния света на случайных центрах сводится к увеличению эффективной длины усиления за счет многократных отражений в среде и к обеспечению обратной связи, в том числе резонансной. Генерация в случайных лазерах с учетом указанных эффектов может быть описана моделями типа диффузионных [6]. Реализованы, однако, и лазерные схемы, в которых усиление происходит вне случайной среды, которая, таким образом, лишь обеспечивает обратную связь [7]. Обзор полученных результатов и перспективных направлений исследования случайных лазеров сделан в [8].

Особо выделяется экспериментальная реализация волоконного лазера со случайной распределенной обратной связью (СРОС) за счет предельно слабого рэлеевского рассеяния [9, 10]. СРОС позволяет получать высокоэффективную генерацию [10] в волоконных ВКР-лазерах, в том числе и многочастотную [11] или узкополосную [12]. Использование в качестве резонаторов длинных отрезков волокон, обеспечивающих заметную величину интегрального обратного рассеяния, позволяет без привлечения дополнительных фильтрующих элементов увеличивать

яркость многомодовых лазерных источников за счет эффекта оптической чистки [13]. Использование поляризованной накачки позволяет получать частично поляризованную генерацию с широким спектром в стандартных волокнах [14] и высокополяризованную генерацию в волокнах с поддержкой поляризации [15].

СРОС за счет рэлеевского рассеяния или искусственно созданных рэлеевских отражателей обеспечивает также и одночастотную генерацию с ультранизкими ширинами линии в схемах как с активными волокнами [16], так и в стандартных волокнах за счет эффекта вынужденного рассеяния Манделъштама–Бриллюэна (ВРМБ) [17]. В частности, волоконные ВРМБ-лазеры со СРОС генерируют излучение с шириной спектра вплоть до единиц герц [18]. Узкие спектральные моды шириной в единицы килогерц наблюдались также в случайном волоконном лазере на основе полупроводникового усилителя [19].

Недавно было показано, что генерация излучения с узким спектром (< 1 МГц), на многие порядки меньшим ширины спектра пропускания (~ 10 ТГц), происходит и в ВКР-лазерах с усилением на вынужденном комбинационном рассеянии (ВКР) и с обратной связью за счет рэлеевского рассеяния [20]. Такой процесс наблюдается вблизи порога генерации и имеет ряд характерных особенностей – одновременно может возникать большое число узких спектральных компонент, положение в спектре которых случайно, и которые существуют ограниченное время (порядка 1–10 мс). Несмотря на потенциал такого режима генерации для создания простых одночастотных источников излучения, ряд свойств подобных узких спектральных мод, в частности, частота их возник-

¹⁾e-mail: gorbunov_oa@nsu.ru

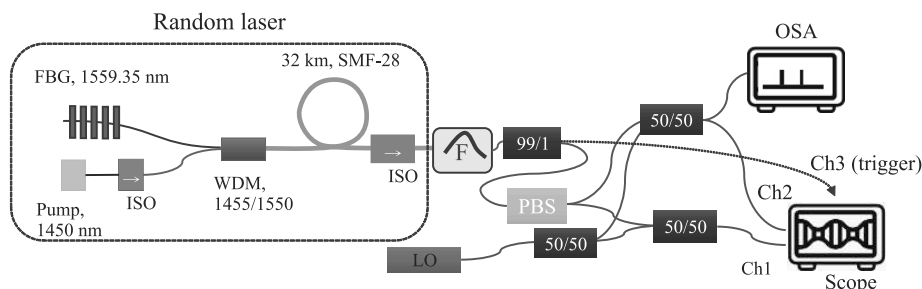


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема случайного волоконного лазера и системы анализа поляризационной динамики. Pump – лазер накачки; FBG – волоконная брэгговская решетка; ISO – изолятор; WDM – спектрально-селективный ответвитель; F – перестраиваемый узкополосный оптический фильтр; PBS – поляризационный делитель; LO – локальный осциллятор; 99/1 – стандартный волоконный ответвитель с коэффициентом деления 99 % : 1 %; 50/50 – волоконные ответвители с поддержкой поляризации и коэффициентом деления 50 % : 50 %; Ch1, Ch2 – каналы, измеряющие интенсивности двух поляризационных компонент сигнала, Ch3 – канал запуска. OSA – анализатор оптического спектра; Scope – осциллограф

новения, зависимость времени генерации от параметров лазера, их поляризация, не изучен. В данной работе мы проводим анализ поляризационных свойств таких мод.

Случайный волоконный лазер, позволяющий наблюдать генерацию узких спектральных мод, включал в себя 32 км стандартного телекоммуникационного волокна SMF-28, в котором происходило распределённое отражение за счет рэлеевского рассеяния и усиление за счет эффекта ВКР. Неполаризованное излучение накачки на длине волны 1455 нм заводилось через спектрально-селективный ответвитель (см. рис. 1). Для уменьшения пороговой мощности и фиксирования длины волны, на которой происходит генерация, с одной стороны волокна была расположена волоконная брэгговская решетка с коэффициентом отражения более 95 % и центральной длиной волны 1550.35 нм. На другом выходе из волокна, составляющего случайный лазер, был установлен дополнительный спектрально-селективный ответвитель для утилизации неиспользованного излучения накачки (на схеме не указан), а также оптический изолятор, исключающий влияние отражений внутри измерительной системы на процесс генерации.

Спектр излучения лазера, измеренный классическим дифракционным спектральным прибором, подтвердил наличие режима генерации узких спектральных компонент в некотором диапазоне мощностей над порогом (см. рис. 2). В спектре наблюдались узкие пики с шириной порядка или даже меньше спектрального разрешения прибора (что происходит благодаря малому времени генерации – меньшему, чем время сканирования аппаратной функции прибора). Дальнейшие измерения проводились при мощности накачки 950 мВт. Полная мощность генерации лазера составляла при этом порядка 50 мВт.

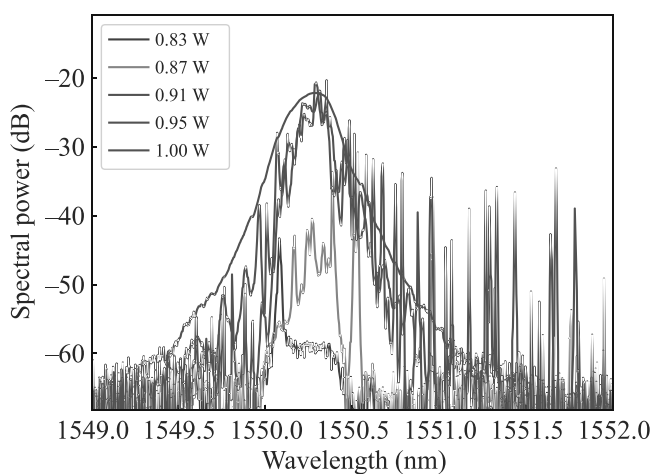


Рис. 2. (Цветной онлайн) Спектр генерации лазера, измеренный классическим спектральным прибором, для разных мощностей накачки

Для анализа поляризационной динамики узких мод использовался метод оптического гетеродинамирования с поляризационным разделением. Излучение исследуемого лазера отфильтровывалось с помощью перестраиваемого оптического фильтра с шириной спектра пропускания 4 ГГц, центральная длина волны которого настраивалась на максимум спектра генерации (1550.35 нм). Излучение после фильтра посылалось на волоконный поляризационный делитель (см. рис. 1), разделяющий излучение лазера на волны с условно x - и y -составляющей компоненты поляризации. Каждый из поляризационных сигналов на выходе делителя смешивался с излучением одного и того же локального осциллятора с помощью волоконных ответвителей 50/50 с сохранением поляризации. Использование волоконных компонент с правильной ориентацией медленных осей волокон с сохранением поляризации позволило добиться полного

согласования поляризационных состояний локального осциллятора и каждого из двух исследуемых каналов. В качестве локального осциллятора использовался перестраиваемый полупроводниковый одночастотный лазер с мощностью 30 мВт и эффективной шириной 2 МГц.

Сигнал интерференции для каждого канала измерялся с помощью быстрых фотодетекторов с полосой пропускания 5 ГГц и оцифровывался с помощью осциллографа с частотной полосой 4 ГГц и частотой дискретизации $2 \cdot 10^{10}$ точек в секунду. Благодаря тому, что сигнал на фотодетекторе складывался из мощного излучения локального осциллятора и слабого исследуемого излучения, в сигнале практически отсутствовали шумы, обусловленные биениями интенсивности исследуемого сигнала [21]. Поэтому результат оконного преобразования Фурье, выполненного для измеренного в каждом из двух каналов фототока, отражает спектральную динамику каждой из поляризаций исследуемого излучения. Различие в чувствительности двух фотодетекторов учитывалось введением соответствующей калибровки.

Примеры спектрограмм, построенных для двух поляризаций с помощью оконного преобразования Фурье с временным окном, ширина и форма которого обеспечивала разрешение по частоте 3 МГц, изображены на рис. 3а и б. В соответствии с ранее опубликованными наблюдениями [20], в спектре на пороге генерации возникают узкие спектральные пики с шириной меньшей, чем разрешаемая, и пропадающие через время порядка нескольких миллисекунд. Узкие спектральные линии наблюдаются как в первом, так и во втором канале одновременно, т.е. имеют в общем случае и x -, и y -компоненты поляризации. Интенсивность обеих поляризационных компонент изменяется синхронно (см. рис. 3с). При этом, однако, отношение интенсивностей может изменяться во времени, и быть отличным от единицы: на рис. 3д представлен пример отношения интенсивностей поляризаций для конкретной спектральной линии. Таким образом, можно заключить, что узкая мода, по крайней мере, частично поляризована: действительно, в противном случае полностью неполяризованного излучения интенсивности в двух каналах были бы равны в каждый момент времени. Далее, поскольку из-за температурных дрейфов и акустических шумов двулучепреломление в волокне постоянно изменяется, происходит и изменение состояния поляризации, а следовательно, меняется и отношение интенсивностей в поляризационных каналах (рис. 3д.). Однако данный эффект проявляется слабо, в том числе ввиду малой – порядка 1 м – длины волокна без под-

держки поляризации, передающего излучение лазера на вход в поляризационный делитель.

Для того, чтобы определить степень поляризации генерируемых узких спектральных мод, мы провели набор статистики для определения вероятности получения заданного отношения интенсивностей. Для этого многократно измерялись спектрограммы в двух поляризационных каналах, в них определялись области, включающие узкие спектральные моды и вычислялось отношение интенсивностей поляризационных сигналов для каждой из мод. Для получения репрезентативной выборки процесс измерения спектрограммы каждый раз запускался по сигналу от дополнительного третьего канала, измеряющего полную мощность отфильтрованного излучения до его разделения по поляризациям (см. рис. 1). Таким образом, запуск происходил при появлении узкой моды в исследуемом спектральном диапазоне независимо от состояния поляризации в ней.

Статистика была набрана по 2000 измерениям. Было обнаружено, что с наибольшей вероятностью происходит генерация моды, в которой одинакова интенсивность x - и y -компонент. При этом возможны случаи, когда интенсивность одной из компонент на два порядка превосходит интенсивность другой. На рисунке 4 (синяя кривая) в двойном логарифмическом масштабе показана функция распределения вероятности в зависимости от отношения интенсивностей R в двух каналах, рассчитанная по экспериментальным данным. Ширина бина в распределении равна 0.5. Форма распределения позволяет утверждать, что все моды обладают высокой степенью поляризации. Действительно, в противном случае в распределении присутствовало бы избыточное количество событий с равными интенсивностями в двух каналах или $R = 1$. Этот факт согласуется с сильной поляризационной зависимостью ВКР-усиления [22] вместе с однородным характером его насыщения [23], которые и должны приводить к генерации поляризованного излучения.

Для проверки такой интерпретации результатов мы провели моделирование отношения интенсивностей

$$R = \frac{I_x}{I_y} = \frac{A_x^2}{A_y^2} \quad (1)$$

в двух поляризационных каналах для генерации моды с произвольной эллиптической поляризацией [24]:

$$\mathbf{E} = (E_x, E_y) = (A_x \cos \omega t, A_y \sin(\omega t - \psi)). \quad (2)$$

Здесь A_x и A_y – амплитуды, ψ – задержка по фазе между компонентами вектора электрического поля $\mathbf{E}$. Отношение R в контексте рассматриваемой

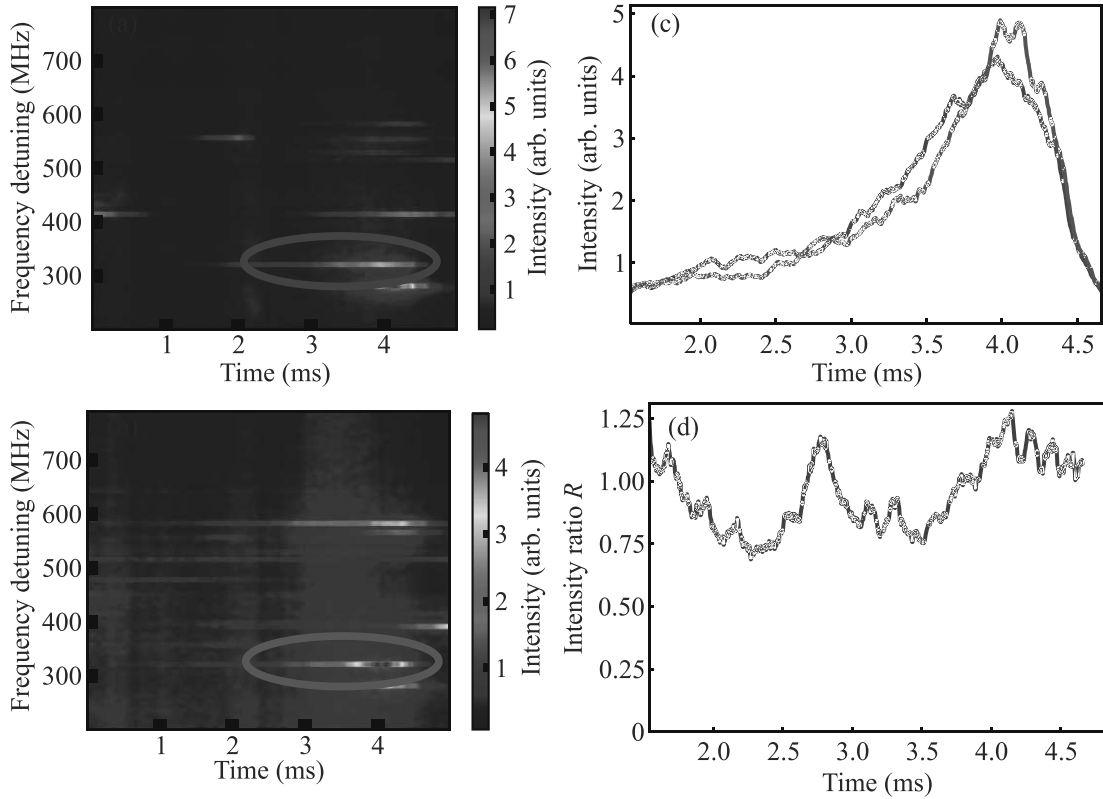


Рис. 3. (Цветной онлайн) Метод анализа временной динамики поляризации моды: (a), (b) – спектрограммы, построенные по измерениям в первом и втором поляризационных каналах соответственно. (c) – Пример временной динамики интенсивности моды в двух каналах (зеленым – для первого канала, красным – для второго) для отстройки 317 МГц. (d) – Динамика отношения интенсивностей R в двух поляризациях

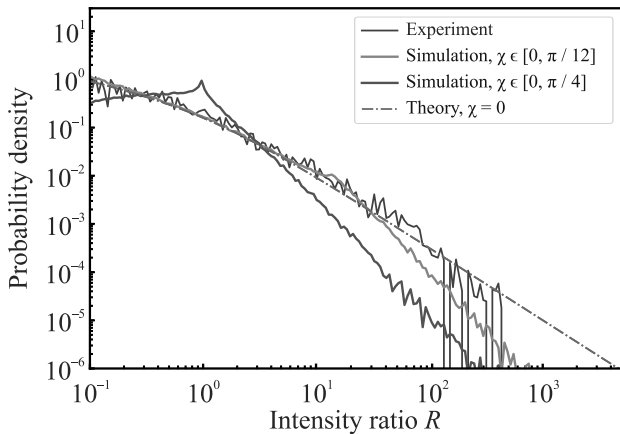


Рис. 4. (Цветной онлайн) Функция распределения вероятности появления узкой моды с заданным соотношением интенсивностей R в двух поляризационных каналах. Синяя кривая – эксперимент, оранжевая и зеленая – результат численного моделирования для разных степеней эллиптичности, серая – предсказания теории для случайной поляризации

задачи удобно выразить через параметры наклона эллипса поляризации относительно оси поляриза-

онного делителя $Ox - \phi$, и эллиптичности χ (тангенс χ равен отношению полуосей эллипса). Используя выражения для параметров Стокса [24] (I_0 – полная интенсивность моды):

$$S_0 = A_x^2 + A_y^2 = 2I_0,$$

$$S_1 = A_x^2 - A_y^2 = S_0 \cos(2\chi) \cos(2\varphi),$$

выразим отношение интенсивностей в каналах осциллографа через параметры φ и χ :

$$R = \frac{A_x^2}{A_y^2} = \frac{S_0 + S_1}{S_0 - S_1} = \frac{1 + \cos(2\chi) \cos(2\varphi)}{1 - \cos(2\chi) \cos(2\varphi)}. \quad (3)$$

Линейной поляризации соответствует $\chi = 0$. Легко убедиться, что в этом случае полученное выражение сводится к

$$R = \cot^2 \varphi. \quad (4)$$

Круговая поляризация описывается значением $\chi = \pi/4$, в этом случае $R \equiv 1$, что совпадает с результатом для неполяризованного света.

Можно предположить, что состояние поляризации мод случайно, т.е. распределение состояний поля по сфере Пуанкаре является равномерным. Результат моделирования отношения R в этом случае

представлен на рис. 4 зеленой кривой; расхождение с экспериментом существенно. Экспериментально не наблюдается максимума при $R = 1$ (обусловленного вкладом поляризаций, близких к круговой) а также вероятность обнаружения больших отношений в моделировании ниже. Следовательно, круговая поляризация мод практически не наблюдается. Моделирование, при котором распределение поляризаций по сфере Пуанкаре равномерно для интервала χ , ограниченного значением $\pi/12$, существенно лучше описывает эксперимент (см. оранжевую кривую на рис. 4). Значение $\pi/12$ выбрано для описания локального роста плотности вероятности при $R \sim 10$, которое может быть обусловлено вкладом поляризации с относительно малой эллиптичностью. Моделирование качественно воспроизводит эту особенность, но все же расходится с экспериментом в области больших отношений R . Из приведенных соображений можно сделать вывод, что поляризация узких спектральных мод не является случайной, а локализована на сфере Пуанкаре вблизи экватора, т.е. близка к линейной.

Не стоит забывать, что в области больших отношений экспериментальные наблюдения искажены также наличием шумов в измерительной системе, которые ограничивают динамический диапазон и максимальную величину измеряемых отношений интенсивностей.

Для плотности вероятности $f(R)$ можно получить и аналитическое выражение. Действительно, количество событий δN , попадающее в интервал $(R; R + \delta R)$ есть $N \cdot \delta R$. С другой стороны, связь между малыми интервалами δR и $\delta \varphi$ может выражена из (3):

$$\delta R \approx -\frac{2 \cos(2\chi) \sin(2\varphi) \delta \varphi}{1 - \cos(2\chi) \cos(2\varphi)^2} =$$

$$= -(R+1)[2R(\cos^2 2\chi + 1) - (R^2 + 1) \sin^2 2\chi]^{1/2} \cdot \delta \varphi.$$

Но в интервал $(\varphi; \varphi + \delta \varphi)$ попадает $\delta N = \frac{2\delta \varphi}{\pi} N$ событий, если угол наклона распределен случайно. Учитывая, что для вероятности попадания в интервал $(R; R + \delta R)$, мы имеем формально

$$dw(R; R + \delta R) \equiv f(R) \delta R = \frac{\delta N}{N},$$

для функции $f(R)$ получаем выражение

$$f = \frac{2}{\pi(R+1)} [2R(1 + \cos^2(2\chi)) - (R^2 + 1) \sin^2(2\chi)]^{-1/2}.$$

Данная функция имеет максимальные значения в крайних точках $R_{\max} = \frac{1+\cos(2\chi)}{1-\cos(2\chi)}$ и $R_{\min} = \frac{1-\cos(2\chi)}{1+\cos(2\chi)}$

(см. также (3)), что может обуславливать локальное увеличение плотности вероятности обнаружения отношения $R \sim 10$ на экспериментальной кривой и обосновывает ее аппроксимацию оранжевой линией (рис. 4).

Для линейной поляризации $\chi = 0$:

$$f_{\text{Lin}}(R) = \frac{1}{\pi \sqrt{R(R+1)}}. \quad (5)$$

Выражение (5), как показано штрихпунктирной линией на рис. 4, достаточно хорошо описывает эксперимент. Это также косвенно подтверждает, что измеряемая поляризация мод близка к линейной.

Степень поляризации мод может быть оценена из следующих соображений. Неполаризованное излучение всегда дает соотношение $R = 1$, а все наблюдаемые соотношения R , отличные от 1, реализуются за счет поляризованного излучения. Вклад неполаризованного света проявлялся бы в увеличении вероятности обнаружения значения $R = 1$ и уменьшении больших значений R , что противоречит экспериментальным результатам (ср. синюю и зеленую кривые на рис. 4). Для регистрации в эксперименте соотношения $R = I_x/I_y = 100$, необходимо, чтобы интенсивность поляризованного излучения с полем, направленным только вдоль оси Ox , в 99 раз превосходила интенсивность проекции поля неполаризованного излучения на эту ось. Таким образом, степень поляризации составляет не менее чем $99/(99+2) = 0.98$.

Наконец, нами были изучены возможные корреляции между поляризациями возникающих одновременно узких мод (в случае, если одновременно существуют две и более мод в спектре). Для этого была собрана статистика из 2000 спектрограм, в которых наблюдалась совместная генерация не менее двух спектральных мод. Среди них выбирались две максимально интенсивные для того, чтобы при дальнейшей обработке влияние шумов было наименьшим. Предполагая высокую степень поляризации и малую степень эллиптичности каждой из мод, состояние поляризаций каждой из них описывалось только азимутом – углом наклона вектора поляризации $\phi = \text{arccctg} \left(\sqrt{\frac{I_x}{I_y}} \right)$ (см. (4)). Измерялось распределение случайного вектора (ϕ_1, ϕ_2) , состоящего из азимутов двух мод, в двумерной плоскости (см. рис. 5).

Форма совместного распределения указывает на то, что поляризации одновременно генерирующихся мод не связаны строгим образом: возможно наблюдение двух мод, у которых азимуты существенно отличаются. Тем не менее, некоторые корреляции внутри совместного распределения присутствуют. Коэффициент корреляции Пирсона, определенный по вы-

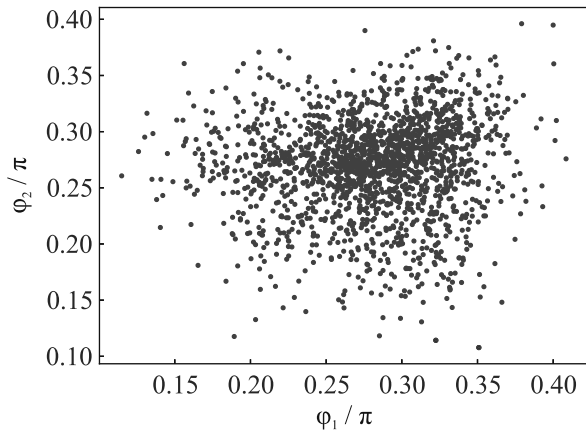


Рис. 5. (Цветной онлайн) Совместное распределение определенных по экспериментальным данным азимутов поляризаций ϕ_1 и ϕ_2 для двух одновременно генерирующихся узких спектральных мод

борке в 2000 измерений, составил 0.08, т.е. с небольшой вероятностью моды приобретают схожие азимуты поляризации.

Таким образом, в данной работе экспериментально были изучены поляризационные свойства узких спектральных мод, возникающих у порога генерации волоконного ВКР-лазера со случайной распределенной обратной связью. Наблюдаемое изменение отношения мощностей в поляризационных каналах со временем говорит как минимум о частичной поляризации излучения каждой из мод, а наблюдаемые отношения интенсивности в поляризационных каналах указывают на степень поляризации более 98 %. При этом поляризации мод, генерирующиеся одновременно, являются практически некоррелированными.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда # 19-12-00318-П.

1. Р. В. Амбарцумян, Н. Г. Басов, П. Г. Крюков, В. С. Летохов, *ЖЭТФ* **51**, 724 (1966).
2. N. M. Lawandy, R. M. Balachandran, A. S. L. Gomes, and E. Sauvain, *Nature* **368**, 436 (1994).
3. E. S. P. Leong, M. K. Chong, S. F. Yu, and K. Pita, *IEEE Photonics Technol. Lett.* **16**, 2418 (2004).
4. M. A. Noginov, *Solid-State Random Lasers*, Springer Series in Optical Sciences, Springer-Verlag, N.Y., USA (2005), v. 105.
5. M. Gagne and R. Kashyap, *Opt. Express* **17**, 19067 (2009).
6. L. Florescu and S. John, *Phys. Rev. E* **70**, 036607 (2004).
7. Y. Xu, L. Zhang, L. Chen, and X. Bao, *Opt. Express* **25**, 15828 (2017).
8. A. S. L. Gomes, A. L. Moura, C. B. de Araujo, and E. P. Raposo, *Prog. Quantum Electron.* **78**, 100343 (2021).
9. S. K. Turitsyn, S. A. Babin, A. E. El-Taher, P. Harper, D. V. Churkin, S. I. Kablukov, J. D. Ania-Castañon, V. Karalekas, and E. V. Podivilov, *Nat. Photonics* **4**, 231 (2010).
10. I. D. Vatnik, D. V. Churkin, and S. A. Babin, *Opt. Express* **20**, 28033 (2012).
11. S. Sugavanam, Z. Yan, V. Kamynin, A. S. Kurkov, L. Zhang, and D. V. Churkin, *Opt. Express* **22**, 2839 (2014).
12. S. Sugavanam, N. Tarasov, X. Shu, and D. V. Churkin, *Opt. Express* **21**, 16466 (2013).
13. Y. Chen, C. Fan, T. Yao, H. Xiao, J. Xu, J. Leng, P. Zhou, A. G. Kuznetsov, I. N. Nemov, A. A. Wolf, S. I. Kablukov, E. V. Podivilov, and S. A. Babin, *J. Phys. Conf. Ser.* **2249**, 012015 (2022).
14. H. Wu, Z. N. Wang, D. V. Churkin, I. D. Vatnik, M. Q. Fan, and Y. J. Rao, *Laser Phys. Lett.* **12**, 015101 (2015).
15. E. A. Zlobina, S. I. Kablukov, and S. A. Babin, *Opt. Lett.* **40**, 4074 (2015).
16. M. I. Skvortsov, S. R. Abdullina, E. V. Podivilov, A. A. Vlasov, D. R. Kharasov, E. A. Fomiryakov, S. P. Nikitin, V. N. Treshchikov, and S. A. Babin, *Photonics* **9**, 590 (2022).
17. H. Chen, S. Gao, M. Zhang, J. Zhang, L. Qiao, T. Wang, F. Gao, X. Hu, S. Li, and Y. Zhu, *Sensors* **20**, 6122 (2020).
18. M. Pang, X. Bao, and L. Chen, *Opt. Lett.* **38**, 1866 (2013).
19. P. Tovar, G. Temporão, and J. P. von der Weid, *Opt. Express* **27**, 31001 (2019).
20. A. E. Kirik, I. D. Vatnik, and D. V. Churkin, *Results Phys.* **28**, 104651 (2021).
21. В. В. Протопопов, Н. Д. Устинов, *Лазерное Гетеродинамирование*, Главная редакция физико-математической литературы издательства "Наука", М. (1985).
22. G. P. Agrawal, *Nonlinear Fiber Optics*, Academic Press, San Diego, USA (2006).
23. S. A. Babin, D. V. Churkin, S. I. Kablukov, and E. V. Podivilov, *J. Opt. Soc. Am. B* **23**, 1524 (2006).
24. С. А. Ахманов, С. Ю. Никитин, *Физическая оптика*, издательство Московского университета, Наука, М. (2004).

Магнитная структура и механизм спин-кроссовера в людовигите Co_3VO_5

Н. Г. Замкова⁺¹⁾, В. С. Жандун⁺, С. Г. Овчинников^{+*}

⁺ Институт физики имени Киренского “Федеральный исследовательский центр “Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук”, 660036 Красноярск, Россия

^{*} Сибирский федеральный университет, 660041 Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 19 июля 2023 г.

После переработки 19 июля 2023 г.

Принята к публикации 25 июля 2023 г.

На основании DFT расчета с потенциалами SCAN предлагается механизм спин-кроссовера в людовигите Co_3VO_5 . В рамках метода Монте-Карло показана роль отдельных обменных взаимодействий в установлении дальнего магнитного порядка.

DOI: 10.31857/S1234567823170032, EDN: jzjain

1. Введение. Оксидобораты со структурой людовигита с общей формулой $\text{M}^{2+}\text{M}^{3+}\text{O}_2\text{VO}_3$ обладают большим разнообразием электронных и магнитных свойств в зависимости от состава. В соединениях со структурой людовигита можно обнаружить ряд интересных особенностей: низкоразмерные магнитные единицы (триады и слои), сосуществование нескольких магнитных подрешеток, сосуществование парамагнетизма и магнитного порядка, наличие в химическом составе различных комбинаций переходных металлов со смешанной валентностью и их случайным распределением по разным кристаллографическим позициям. В структуру людовигита могут входить различные элементы M^{2+} и M^{3+} , но на сегодняшний день экспериментально известны только два гомометаллических людовигита с атомами переходных металлов: Fe_3VO_5 и Co_3VO_5 [1–5]. Несмотря на подобные кристаллические структуры, эти два соединения имеют кардинально различные физические свойства. Так, Fe_3VO_5 при комнатной температуре испытывает структурный переход с удвоением параметра ячейки вдоль оси c , а затем два магнитных перехода при $T_{N1} = 112\text{ K}$ и $T_{N2} = 70\text{ K}$, соответствующие независимому упорядочению различных магнитных подрешеток [1, 2]. Наоборот, Co_3VO_5 структурно стабилен и испытывает один магнитный переход при температуре $\sim 42\text{ K}$ [3, 4]. В [2] предполагается, что структурный переход в Fe_3VO_5 обусловлен димеризацией катионов железа в одной из триад и образованием волн зарядовой плотности. В людовигите Co_3VO_5 ситуация другая: чтобы избежать структурных искажений трехвалентный атом

кобальта Co^{3+} переходит в низкоспиновое состояние. Таким образом, одним из основных отличий людовигитов Fe_3VO_5 и Co_3VO_5 является существование в Co_3VO_5 спин-кроссовера [3, 4]. Оба соединения подробно исследованы как экспериментально, так и теоретически, в том числе и из первых принципов [5–8]. Однако, в расчетных работах основное внимание уделяется магнитной структуре данных людовигитов, тогда как механизм спинкроссовера в Co_3VO_5 остается неясным. Целью настоящей работы является *ab initio* исследование обменных взаимодействий и механизма спин-кроссовера в Co_3VO_5 . Обычно спиновый кроссовер описывают как пересечение термов двух локализованных спинов, здесь же мы показываем механизм кроссовера на зонном языке.

2. Детали расчета. Расчеты проводились в пакете Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) [9, 10] с использованием псевдопотенциалов PAW-PBE [11, 12]. Конфигурация валентных электронов для ионов Co, V и O бралась: $3d^7 4s^2$, $2s^2 2p^1$, $2s^2 2p^4$, соответственно. Обменно-корреляционный функционал учитывался с использованием приближения обобщенного градиента (GGA). Число плоских волн было ограничено энергией 520 эВ. При оптимизации кристаллических структур использовалась сетка $4 \times 2 \times 11$ Монкхорста–Пака [13]. Параметры и координаты атомов оптимизировались до тех пор, пока силы на ионах не стали меньше 1 мэВ/А. Теоретико-групповой анализ магнитных структур выполнен в пакете FullProf (BASIREPS) [14] для волновых векторов $\mathbf{k} = (0, 0, 0)$ и $\mathbf{k} = (0, 0, 0.5)$. GGA + U расчеты выполнены в рамках схемы Дударева [15].

¹⁾ e-mail: ngzamkova@gmail.com

3. Магнитная структура. Структуру людвига с пр. гр. $Pb\bar{a}m$ (#55) принято представлять в виде лестничной структуры. В структуре людвига атомы переходного металла занимают четыре неэквивалентных позиции: $2a$, $2d$, $4g$ и $4h$. Атомы на позициях $2a$ и $4g$ образуют одну трехступенчатую лестницу или триаду (3-1-3), атомы на позициях $2d$ и $4h$ – вторую триаду (4-2-4) (рис. 1). В людвигите

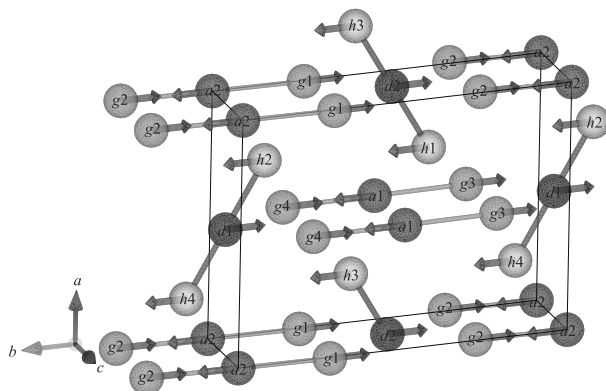


Рис. 1. (Цветной онлайн) Магнитная структура людвига Co_3VO_5 . Показаны только атомы кобальта

Co_3VO_5 триада 3-1-3 занята двухвалентными атомами кобальта Co^{2+} , триада же 4-2-4 занята как двухвалентными Co^{2+} на позициях $2d$, так и трехвалентными Co^{3+} на позициях $4h$. Все атомы кобальта расположены в сильно искаженных кислородных октаэдрах.

Как показано в [3, 4], Co_3VO_5 испытывает магнитный переход в полностью упорядоченное состояние при $T_N = 42\text{ K}$, при этом трехвалентные атомы кобальта на позициях $4h$ находятся в низкоспиновом состоянии (LS). При высоких температурах $T > 500\text{ K}$ эти атомы переходят в высокоспиновое состояние (HS). Магнитная структура (рис. 1) людвига Co_3VO_5 определена в работах [3, 4]. Экспериментальная магнитная структура является коллинеарной и, согласно теоретико-групповому анализу, проведенному в [3, 5], описывается одним неприводимым представлением (НП) для всех магнитных подрешеток $\tau_5(y)$ с собственным вектором

	$2a$	$2d$	$4g$	$4h$	
LS	--	++	++++	0000	.
HS	--	++	++++	----	

Для определения основного магнитного состояния в людвигите Co_3VO_5 были рассчитаны полные энергии ряда коллинеарных и неколлинеарных магнитных конфигураций, построенным согласно НП

пр. гр. $Pb\bar{a}m$ при $k = 0$ и $k = (0, 0, 0.5)$ и пр. гр. $Pb\bar{n}m$ при $k = 0$ (табл. 1). В частности, были рассмотрены магнитные конфигурации, упоминающиеся в литературе для соединений со структурой людвига [1, 3–7, 16]. Расчет полных энергий для всех магнитных конфигураций был проведен в приближении $GGA + U$ с $U = 4\text{ eV}$ для атомов кобальта. При данном значении параметра U наиболее энергетически выгодной оказывается экспериментально установленная магнитная конфигурация [3, 4], но с ионом Co^{3+} на позиции $4g$ в HS состоянии (рис. 1).

Таблица 1. Разложение магнитного представления пр. гр. $Pb\bar{a}m$ по НП при $k = 0$ и $k = (0, 0, 0.5)$ и пр. гр. $Pb\bar{n}m$ при $k = 0$

$Pb\bar{a}m, k = 0$	
$2a, 2d$	$\tau_1 + \tau_3 + \tau_5 + \tau_7$
$4g, 4h$	$\tau_1 + \tau_2 + \tau_3 + \tau_4 + \tau_5 + \tau_6 + \tau_7 + \tau_8$
$Pb\bar{a}m, k = (0, 0, 0.5)$	
$2a$	$\tau_1 + \tau_3 + \tau_5 + \tau_7$
$2d$	$\tau_2 + \tau_4 + \tau_6 + \tau_8$
$4g$	$\tau_1 + \tau_2 + \tau_3 + \tau_4 + \tau_5 + \tau_6 + \tau_7 + \tau_8$
$4h$	$2\tau_1 + \tau_2 + 2\tau_3 + \tau_4 + \tau_5 + 2\tau_6 + \tau_7 + 2\tau_8$
$Pb\bar{n}m, k = 0$	
$4a$	$3\tau_1 + 3\tau_3 + 3\tau_5 + 3\tau_7$
$4c$	$\tau_1 + \tau_2 + 2\tau_3 + \tau_4 + \tau_5 + 2\tau_6 + \tau_7 + \tau_8$
$8d$	$3\tau_1 + 3\tau_2 + 3\tau_3 + 3\tau_4 + 3\tau_5 + 3\tau_6 + 3\tau_7 + 3\tau_8$

В обоих типах триад 3-1-3 и 4-2-4 упорядочение атомов антиферромагнитное, тогда как вдоль оси c упорядочение триад ферромагнитное. Однако, в приближении $GGA + U$ не удается однозначно определить энергетическую выгодность HS или LS конфигураций, которая во многом зависит от значения параметра U .

Чтобы избежать подобной неоднозначности в определении основного состояния, был проведен расчет полной энергии данной магнитной конфигурации с атомом Co^{3+} в HS и LS состояниях в более строгом приближении с потенциалами SCAN [17]. При расчете энергий проводилась полная релаксация структуры, как по параметрам элементарной ячейки, так и по координатам атомов. Результаты расчета вместе с экспериментальными данными приведены в табл. 2. Как видно, расчет SCAN устанавливает, что наиболее энергетически выгодной при низких температурах действительно является магнитная конфигурация с Co^{3+} в LS состоянии.

Что же касается высокотемпературной фазы, то согласно работе [4], переход трехвалентных атомов Co^{3+} в HS состояние при высокой температуре $T > 500\text{ K}$ сопровождается увеличением объема элемен-

Таблица 2. Экспериментальные и рассчитанные с использованием потенциалов SCAN параметры решетки (a, b, c), объем элементарной ячейки V и магнитные моменты ионов кобальта на позициях $2a$ (M1), $2d$ (M2), $4g$ (M3) и $4h$ (M4) в HS и LS конфигурациях. В последних двух строках приведены энергии (E) LS состояния относительно HS состояния и величина энергетической щели (E_g)

	Эксперимент [3, 4]		SCAN			
			Низкотемпературная фаза		Высокотемпературная фаза	
	HS (700K)	LS (2K)	HS	LS	HS	LS
$a, \text{\AA}$	9.27	9.32	9.16	9.28	9.26	
$b, \text{\AA}$	12.25	11.95	12.14	11.88	12.26	
$c, \text{\AA}$	3.05	2.96	3.00	2.95	3.12	
$V, \text{\AA}^3$	346.35	329.67	334.26	337.52	357.94	
M1, μ_B		3.4	2.46	2.62	2.56	2.62
M2, μ_B		−3.06	−2.68	−2.60	−2.68	−2.65
M3, μ_B		−3.38	−2.85	−2.63	−2.9	−2.71
M4, μ_B		0.11	2.32	−0.07	2.38	0.15
$E, \text{эВ}$			0.0	−2.1973	0.0	0.4421
$E_g, \text{эВ}$		1.7	0.0	0.4	0.0	0.0

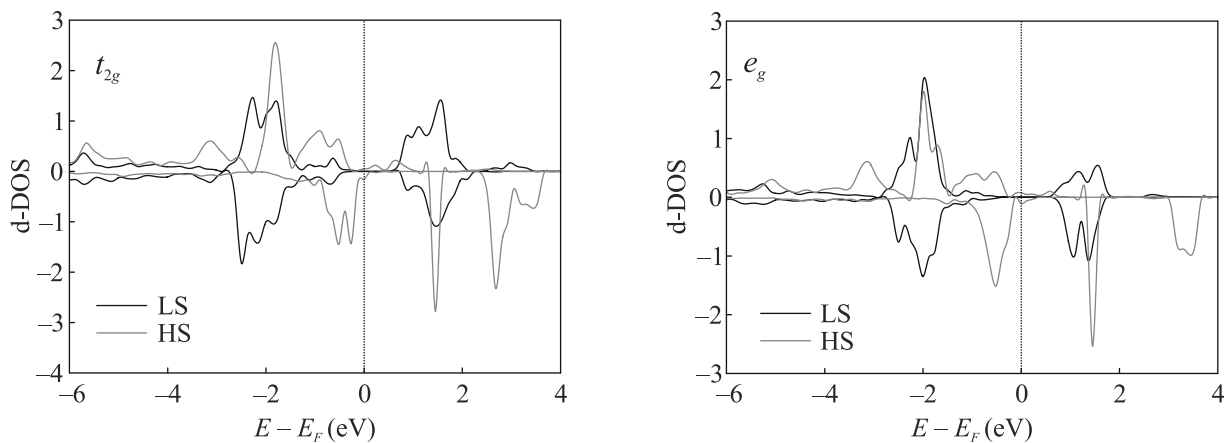


Рис. 2. (Цветной онлайн) Плотность состояний t_{2g} и e_g электронов людовигита Co_3BO_5 в HS (светло-коричневая линия) и LS (черная линия) состояниях

тарной ячейки на $\sim 5\%$. Однако, в нашем расчете после полной оптимизации структуры с атомом Co^{3+} в HS состоянии объем элементарной ячейки практически не изменился. Это связано с тем, что высокотемпературная фаза не является равновесной структурой при нулевой температуре. Поэтому для имитации теплового расширения решетки в высокотемпературной фазе при расчете полных энергий для HS и LS состояний Co^{3+} была использована элементарная ячейка, полученная при приложении гидростатического давления $P = -10$ ГПа. При этом объем элементарной ячейки увеличивается на 5.7% по сравнению с объемом ячейки в основном LS состоянии. Как видно (последние два столбца в табл. 2), при таком увеличении объема переход атома Co^{3+} в HS состояние становится энергетически выгодным, что согласуется с экспериментом [3, 4].

4. Спин-кроссовер. На рисунке 2 приведены плотности состояний (DOS) d -электронов Co^{3+} на позиции $4h$ в HS и LS состояниях. Как хорошо известно, спиновое состояние d^6 ионов переходного металла, в октаэдрическом окружении определяется конкуренцией между внутриаомным обменом и энергией кристаллического поля. Обменная энергия благоприятствует HS состоянию с конфигурацией $(t_{2g}^4 e_g^2)$, в то время как кристаллическое поле благоприятствует LS состоянию $(t_{2g}^6 e_g^0)$. Однако, DOS d -электронов Co^{3+} не содержит ярких пиков, которые можно было бы интерпретировать как расщепление d -уровней в октаэдрическом кристаллическом поле (рис. 2). Это обусловлено тем, что кислородные октаэдры в структуре людовигита искажены, вследствие чего атомы кобальта находятся в кристаллическом поле более низкой симметрии (триклинной) и меха-

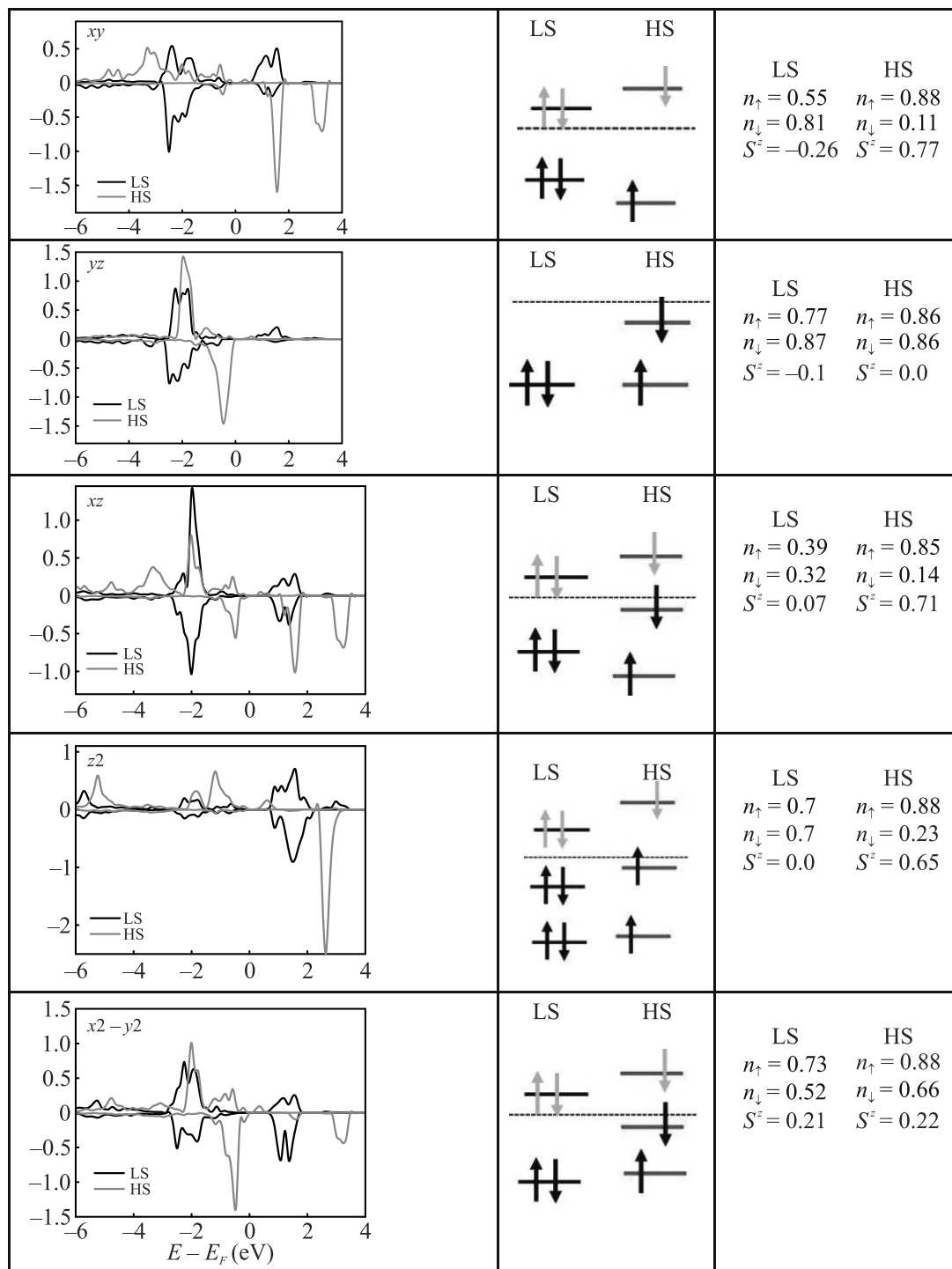


Таблица 3. Плотность состояний d -электронов различной симметрии (первый столбец) и схематическое расположение уровней для электронов со спином вверх и вниз (второй столбец) в HS (светло-коричневая линия) и LS (черная линия) состояниях. В последнем столбце приведены числа заполнения соответствующих энергетических зон

низм перехода из LS состояния в HS более сложен. d -электроны Co^{3+} образуют энергетические зоны шириной $\sim 4\text{--}6$ эВ, при этом DOS содержит хорошо выраженные пики вблизи энергии Ферми. При перехо-

де из LS в HS состояние увеличивается расщепление между состояниями электронов со спином вверх и спином вниз как для t_{2g} -электронов, так и для e_g -электронов. В HS состоянии пики, соответствующие

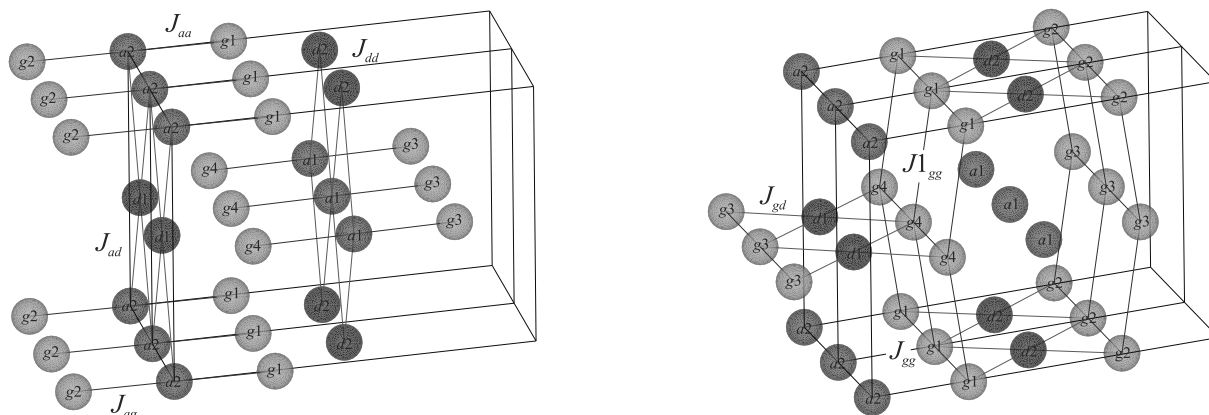


Рис. 3. Обменные взаимодействия в людовигите Co_3VO_5 в LS конфигурации. Показаны только магнитные ионы кобальта на позициях $2a$, $2d$ и $4g$

электронам со спином, вверх смещаются ниже энергии Ферми и эти состояния становятся занятыми. В то же время пики, соответствующие электронам со спином вниз, смещаются в сторону более высоких энергий и начинают опустошаться.

Как в HS, так и в LS состояниях, t_{2g} и e_g состояния, образующие выраженные пики в DOS, имеют одни и те же энергии. Тем не менее, различные d -орбитали дают разные вклады в образование магнитного момента Co^{3+} в HS состоянии. Механизм формирования магнитного момента одинаков для всех типов d -орбиталей и связан с расщеплением между состояниями электронов со спином вверх и спином вниз (табл. 3, первые два столбца), однако величины этого расщепления отличаются для d -электронов различной симметрии. В таблице 3 в последнем столбце приведены числа заполнения энергетических зон, образованных d -электронами различной симметрии. Как видно, наибольший вклад в формирование магнитного момента при переходе атома кобальта в HS состояние вносят орбитали d_{xy} , d_{xz} и d_z^2 .

Таблица 4. Обменные взаимодействия в людовигите Co_3VO_5

J_{dd}	J_{aa}	J_{ag}	J_{ad}	J_{gg}	J_{1gg}	J_{dg}
59.9 K	55.1 K	-38.6 K	-19.6 K	8.5 K	8.2 K	-3.2 K

5. Моделирование магнитного перехода методом Монте-Карло. В структуре людовигита обычно выделяют структурные элементы в виде трехступенчатых лестниц или триад 3-1-3 и 4-2-4. Так, в людовигите Fe_3VO_5 наблюдается два магнитных перехода, связанных с последовательным упорядочением таких триад. В отличие от Fe_3VO_5 в кобальтовом людовигите позиция $4h$ занята трехвалентным ионом кобальта Co^{3+} , который при

температурах ниже комнатной находится в низкоспиновом состоянии, и триада 4-2-4 разрушается. На рисунке 3 показаны основные обменные взаимодействия в людовигите Co_3VO_5 с ионом Co^{3+} в LS состоянии. Расчет обменных взаимодействий проводился по алгоритму, описанному в [18] в рамках модели Изинга. При этом магнитный момент двухвалентных ионов кобальта на позициях $2a$, $2d$ и $4g$ держался равным расчетному значению $\approx 2.65\mu_B$, а магнитный момент трехвалентного иона кобальта – равным нулю. Полученные значения обменных взаимодействий приведены в табл. 4. Наиболее сильными взаимодействиями здесь являются ферромагнитные взаимодействия между ионами Co^{2+} на позициях $2a$ (J_{aa}) и $2d$ (J_{dd}) вдоль оси c и антиферромагнитные взаимодействия между ионами Co^{2+} на позициях $2a$ и $4g$ (J_{ag}) в триадах 3-1-3 и позициях $2a$ и $2d$ (J_{ad}) в плоскостях ac . Эти взаимодействия позволяют выделить две структурные единицы в людовигите Co_3VO_5 : триады 3-1-3, содержащие ионы на позициях $2a$ и $4g$, и плоскости ac , образованные ионами на позициях $2a$ и $2d$. Триады связаны ферромагнитными взаимодействиями между ионами на позициях $4g$ вдоль оси c (J_{gg}) и вдоль оси a (J_{1gg}) и слабым антиферромагнитным взаимодействием в плоскости bc (J_{dg}).

С полученными обменными константами методом Монте-Карло был проведен расчет температуры магнитного перехода в Co_3VO_5 с ионом Co^{3+} , находящемся в LS состоянии. На рисунке 4а показаны температурные зависимости намагниченности отдельных магнитных подрешеток и полной намагниченности, на рис. 4б – магнитной восприимчивости. Все подрешетки упорядочиваются при одной температуре $T_c \approx 118$ K.

Температура магнитного перехода, полученная методом Монте-Карло, примерно в три раза пре-

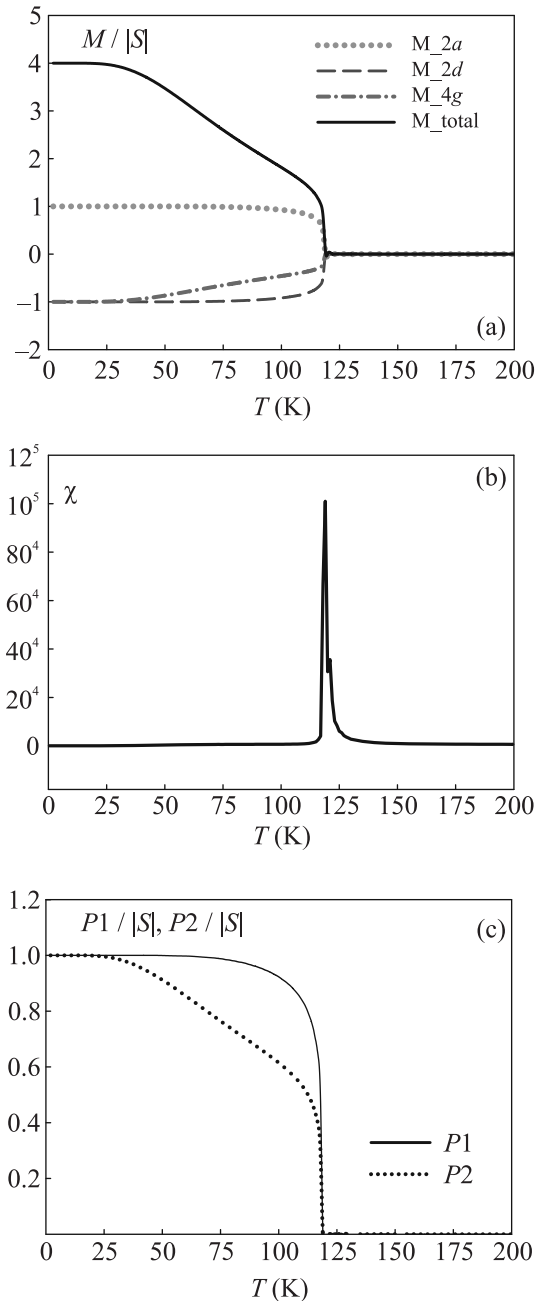


Рис. 4. Температурные зависимости (а) – полной намагниченности и намагниченностей отдельных магнитных подрешеток; (б) – магнитной восприимчивости; (с) – параметров порядка $P1$ и $P2$ (см. текст). $|S| = 2.65\mu_B$

вышает экспериментальную температуру перехода $T_c \approx 42$ K [3, 4], что характерно для расчетов методом Монте-Карло. Тем не менее, моделирование методом Монте-Карло позволяет проанализировать роль отдельных обменных взаимодействий в процессе упорядочения магнитных моментов ионов кобальта. Так, в работе [3] отмечалась важная роль взаимодействия триад 3-1-3 через ион кобальта на пози-

ции $2d$ в установлении дальнего магнитного порядка. Действительно, триады 3-1-3 связаны через ион на позиции $2d$ сильным ферромагнитным взаимодействием J_{ad} и слабым антиферромагнитным J_{dg} . Введем два параметра порядка, отвечающие за упорядочение магнитных моментов в плоскости ac :

$$P1 = \frac{1}{4}(S_{a1} - S_{d2} + S_{a2} - S_{d1}),$$

и в триадах 3-1-3:

$$P2 = \frac{1}{6}(S_{a1} - S_{g3} - S_{g4} + S_{a2} - S_{g1} - S_{g2}).$$

Температурные зависимости $P1$ и $P2$ показаны на рис. 4с. Как видно, триады начинают разупорядчиваться при температуре ~ 50 K, но за счет более сильного взаимодействия J_{ad} в плоскости дальний порядок сохраняется до более высоких температур. Таким образом, температура магнитного перехода определяется взаимодействиями в плоскости ac .

Заключение. В рамках DFT расчета с использованием потенциала SCAN определена магнитная структура людовигита Co_3VO_5 . Показано, что при низких температурах энергетически выгодной является коллинеарная антиферромагнитная структура с ионом Co^{3+} в LS состоянии. На основании расчета электронной структуры иона Co^{3+} в LS и HS состояниях предложен механизм спинкроссовера, связанный с расщеплением между состояниями электронов со спином вверх и спином вниз. В рамках модели Изинга оценены обменные взаимодействия в Co_3VO_5 с ионом Co^{3+} в LS состоянии. Показано, что температура магнитного перехода определяется магнитными взаимодействиями между ионами, расположенными в плоскости ac .

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда #22-22-20024 <https://rscf.ru/project/22-22-20024/>, Красноярского краевого фонда науки.

1. P. Bordet and E. Suard, Phys. Rev. B **79**, 144408 (2009).
2. M. Mir, J. Janczakb, and Y. P. Mascarenhas, J. Appl. Cryst. **39**, 42 (2006).
3. D. C. Freitas, C. P. C. Medrano, D. R. Sanchez, M. Nunez Regueiro, J. A. Rodríguez-Velamazán, and M. A. Continentino, Phys. Rev. B **94**, 174409 (2016).
4. N. V. Kazak, M. S. Platunov, Yu. V. Knyazev, M. S. Molokeev, M. V. Gorev, S. G. Ovchinnikov, J. Bartolomé, A. Arauzo, V. V. Yumashev, S. Yu. Gavrilkin, F. Wilhelm, and A. Rogalev, Phys. Rev. B **103**, 094445 (2021).
5. Yu. V. Knyazev, N. V. Kazak, I. I. Nazarenko, S. N. Sofronova, N. D. Rostovtsev, J. Bartolomec,

- A. Arauzod, and S.G. Ovchinnikov, J. Magn. Magn. Mater. **474**, 493 (2019).
6. M. Matos, J. Terra, D.E. Ellis, and A.S. Pimentel, J. Magn. Magn. Mater. **374**, 148 (2015).
7. M. Matos, J. Terra, and D.E. Ellis, Phys. Stat. Sol. B **256**, 1900298 (2019).
8. E. Vallejo and M. Avignon, J. Magn. Magn. Mater. **435**, 33 (2017).
9. G. Kresse and J. Furthmuller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).
10. P.E. Blochl, Phys. Rev. B **50**, 17953 (1994).
11. G. Kresse and D. Joubert, Phys. Rev. B **59**, 1758 (1999).
12. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).
13. H. J. Monkhorst and J. D. Pack, Phys. Rev. B **13**, 5188 (1976).
14. J. Rodriguez-Carvajal, Physica B **192**, 55 (1993).
15. S.L. Dudarev, G.A. Botton, S.Y. Savrasov, C.J. Humphreys, and A.P. Sutton, Phys. Rev. B **57**, 1505 (1998).
16. F. Damay, J. Sottmann, F. Lainé, L. Chaix, M. Poienar, P. Beran, E. Elkaim, F. Fauth, L. Nataf, A. Guesdon, A. Maignan, and C. Martin, Phys. Rev. B **101**, 094418 (2020).
17. J. Sun, A. Ruzsinszky, and J.P. Perdew, Phys. Rev. Lett. **115**, 036402 (2015).
18. H. Xiang, Ch. Lee, H.-J. Koo, X. Gonga, and M.-H. Whangbo, Dalton Trans. **42**, 823 (2013).

Взаимосвязь магнетизма и топологии в MnBi_2Te_4

В. В. Вальков¹⁾, А. О. Злотников, А. Гамов

Институт физики им. Л. В. Киренского, Федеральный исследовательский центр
“Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук”, 660036 Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 21 июля 2023 г.

После переработки 26 июля 2023 г.

Принята к публикации 28 июля 2023 г.

При учете структуры трехслойки Te-Mn-Te , входящей в слоевую последовательность $\text{Te-Bi-Te-Mn-Te-Bi-Te}$ ван-дер-ваальсовского монокристалла MnBi_2Te_4 , эффектов кристаллического поля, спин-орбитального взаимодействия и процессов ковалентного смешивания электронных состояний ионов Mn^{2+} с электронными состояниями ионов Te^{2-} в режиме сильных электронных корреляций проанализирована зависимость топологии спектра фермиевских возбуждений от магнитного состояния системы. В ферромагнитной фазе, возникающей благодаря кинематическому взаимодействию фермионов Хаббарда, число Черна равно 1, что соответствует нетривиальной топологии энергетической структуры трехслойки Te-Mn-Te . В парамагнитной фазе число Черна равно нулю и топология тривиальна. Для построенных спин-орбиталей магнитные моменты ионов Mn^{2+} ориентированы перпендикулярно слоям. При этом магнитные моменты Mn^{2+} из ближайших слоев по механизму Андерсона упорядочены антиферромагнитно.

DOI: 10.31857/S1234567823170044, EDN: jznvq

1. Введение. Формирование дальнего магнитного порядка в топологических изоляторах приводит к ряду нетривиальных эффектов, таких как формирование щели в спектре возбуждений поверхностных состояний и реализация квантового аномального эффекта Холла [1–3]. Недавно нетривиальная топология электронной структуры с формированием объемных инвертированных зон, а также дираковского конуса, соответствующего поверхностным состояниям, при реализации дальнего антиферромагнитного (АФМ) порядка были предсказаны в MnBi_2Te_4 на основе первопринципных расчетов [4–6], а также подтверждены с помощью ARPES [5, 7]. Таким образом, MnBi_2Te_4 относится к АФМ топологическим изоляторам, описанным ранее [8].

Соединение MnBi_2Te_4 содержит последовательность из семи слоев $\text{Te-Bi-Te-Mn-Te-Bi-Te}$ (семислойка), расположенных перпендикулярно оси z [9]. Каждый слой обладает треугольной решеткой. Магнитная структура Mn характеризуется наличием анизотропии типа “легкая ось” перпендикулярно слоям [10]. Внутри слоя реализуется ферромагнитное упорядочение ионов Mn. Данные по неупругому рассеянию нейтронов демонстрируют также наличие конкурирующего АФМ обмена между следующими за ближайшими соседями в слое с величиной обменной связи, близкой к критической, когда происходит смена типа магнитной структуры [11]. Между сло-

ями Mn формируется АФМ упорядочение типа А с температурой Нееля 24 К.

Несмотря на наличие первопринципных расчетов электронной структуры MnBi_2Te_4 , получение эффективной низкоэнергетической модели позволяет существенно продвинуться в понимании и упрощении описания топологических особенностей материала и поверхностных состояний. Ранее была сформулирована эффективная модель двухслоек Te-Bi с учетом вкладов от магнитных ионов Mn [4]. В рамках этой модели было показано, что поверхностные состояния распространяются вглубь на расстояние, соответствующее двум семислойкам [12].

Топологический инвариант принимает нетривиальные значения для пленок MnBi_2Te_4 , содержащих нечетное число семислоек [6, 13]. Таким образом, интерес представляют соединения с нескомпенсированным магнитным моментом у поверхности. В этом случае возникает щель в дираковском конусе поверхностных состояний АФМ топологического изолятора, сопровождаемая нарушением симметрии по отношению к последовательному действию операции инверсии времени и примитивной трансляции. Известно, что для разных образцов величина щели сильно варьируется от исчезающе малой до десятков мэВ. Возможные причины этого обсуждались в миниобзоре [14].

Несмотря на отмеченные успехи в понимании природы возникновения нетривиальной топологии в MnBi_2Te_4 , ряд вопросов остается проблематич-

¹⁾e-mail : vvv@iph.krasn.ru

ным. Загадочной, в частности, представляется причина формирования ферромагнитного упорядочения в слоях ионов марганца при диэлектрическом характере основного состояния рассматриваемого соединения. Малоизученной является и причина происхождения сильной одноосной анизотропии в слоях ионов марганца. При рассмотрении этих тем первостепенное значение приобретает вопрос о влиянии процессов ковалентного смешивания спин-орбиталей ионов марганца и теллура на энергетическую структуру системы и ее топологические свойства.

Эти вопросы обсуждаются в данной работе.

2. Базисные состояния $Te-Mn-Te$ и гамильтониан трехслойки в представлении Ванье. Существенную роль в формировании нетривиальной топологии энергетической структуры топологического магнетика $MnBi_2Te_4$ играют подсистемы из трех слоев $Te-Mn-Te$. Они образованы из слоя ионов Mn^{2+} , выше и ниже которого находятся слои ионов Te^{2-} . В каждом слое ионы находятся в узлах треугольной решетки. При этом узлы решеток теллура смещены относительно положения ионов марганца так, как показано на рис. 1.

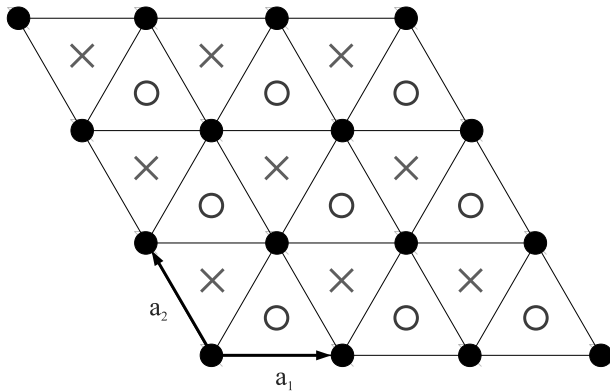


Рис. 1. (Цветной онлайн) Фрагмент кристаллической структуры трехслойки $Te-Mn-Te$. Положения ионов Mn^{2+} , обозначенных темными кружками, образуют треугольную решетку в средней плоскости трехслойки. Над ними и под ними находятся ионы Te^{2-} , упорядоченные по схеме треугольной решетки. Проекция центров верхних ионов Te^{2-} на плоскость расположения Mn^{2+} показаны красными крестиками. Светлыми кружками обозначены проекции на среднюю плоскость положений ионов Te^{2-} , лежащих в нижней плоскости трехслойки

При построении базиса электронных состояний и гамильтониана, отражающего структуру энергетических зон, находящихся вблизи химпотенциала, будем основываться на характере расщепления электронных конфигураций $3d^5$ ионов Mn^{2+} и $5p^6$ ионов Te^{2-}

под влиянием кристаллического поля (КП) и спин-орбитального взаимодействия (СОВ).

Ионы Mn^{2+} находятся в КП тригональной симметрии (точечная группа D_{3d}). Поэтому десятикратно вырожденный (при учете спина электрона) $3d$ -уровень в соответствии с теоремой Крамерса расщепляется на совокупность дублетов.

Применение теоремы Вигнера–Экарта позволяет установить взаимосвязь между расщепленными уровнями энергий и видом спин-орбиталей на основе эквивалентного гамильтониана (ЭГ). Для группы D_{3d} этот гамильтониан записывается в виде [15]

$$H_0 = B_2^0 \hat{O}_2^0 + B_4^0 \hat{O}_4^0 + B_4^3 \hat{O}_4^3 - \lambda(\mathbf{L}\mathbf{s}), \quad (1)$$

где $\hat{O}_n^m$ – операторы Стивенса [16], а $\mathbf{L}$ и $\mathbf{s}$ – векторные операторы орбитального момента и спина электрона соответственно. Коэффициенты B_n^m являются параметрами КП, λ – константа СОВ.

Поскольку главные эффекты расщепления связаны с октаэдрическими компонентами КП, то большая часть состояний ЭГ сохраняет классификацию по проекциям орбитального момента и спина.

При выполнении неравенств

$$5B_4^0 < B_2^0 < -(20/3)B_4^0, \quad B_4^0 < 0 \quad (2)$$

реализуется ситуация, когда наполовину заполненному дублету соответствуют спин-орбитали $|\Psi_{f\sigma}^{(d)}\rangle$ [17]

$$\begin{aligned} |\Psi_{f\uparrow}^{(d)}\rangle &= a|f; +2\uparrow\rangle + b|f; -1\uparrow\rangle + c|f; 0\downarrow\rangle, \\ |\Psi_{f\downarrow}^{(d)}\rangle &= a|f; -2\downarrow\rangle - b|f; +1\downarrow\rangle - c|f; 0\uparrow\rangle. \end{aligned} \quad (3)$$

При этом два других полностью занятых электронами дублета обладают меньшими энергиями и для дальнейшего рассмотрения становятся несущественными. Оставшиеся два дублета обладают значительно большими энергиями и ими можно пренебречь.

Здесь и в дальнейшем принято, что ионы Mn^{2+} находятся в узлах, нумеруемых латинскими буквами $f, f', \dots$. Положения этих ионов формируют F-подрешетку. Правые части (3) представляют суперпозицию состояний, каждое из которых в обозначениях кет-векторов характеризуется номером узла f , значением проекции орбитального момента d состояния, а также проекцией спина. В расчетах использовались значения параметров ЭГ: $B_2^0 = 0.3$, $B_4^0 = -0.2$, $B_4^3 = 0.1$, $\lambda = -0.2$. При этом $|a| \gg |b|, |c|$.

Важность спин-орбиталей $|\Psi_{f\sigma}^{(d)}\rangle$ обусловлена тем, что они образуют базисные функции, из которых формируется коллективизированная зона, связанная

с $3d$ состояниями ионов марганца и которая находится вблизи химпотенциала. Существенным для дальнейшего является преобладающий вклад в спин-орбитали состояний с наибольшими по абсолютной величине значениями $J_z = L_z + s_z$.

Используя этот базис, в схеме сильной связи запишем гамильтониан H_d , отражающий подсистему электронных состояний, находящихся на ионах Mn^{2+}

$$\hat{H}_d = \sum_f [\varepsilon_d \hat{n}_f + U \hat{n}_{f\uparrow} \hat{n}_{f\downarrow}] + \sum_{ff'\sigma} t_{ff'}^d d_{f\sigma}^+ d_{f'\sigma}. \quad (4)$$

Суммирование по индексам f, f' соответствует суммированию по тем узлам решетки, в которых находятся ионы марганца. Фермиевские операторы $d_{f\sigma}^+$ ($d_{f\sigma}$) используются для описания процессов рождения (уничтожения) электронов на узлах f с проекцией спина $\sigma = \pm 1/2$, $\hat{n}_{f\sigma} = d_{f\sigma}^+ d_{f\sigma}$ – оператор числа электронов на узле f с проекцией спина σ . Величина ε_d обозначает энергию электрона на ионе Mn^{2+} , энергия хаббардовского отталкивания обозначена через U , $t_{ff'}^d$ – интеграл перескока электрона между ионами марганца, находящимися на узлах f и f' . Видно, что оператор $\hat{H}_d$ является гамильтонианом модели Хаббарда [18] для треугольной решетки.

Для состояний, связанных с ионами Te^{2-} , будем использовать индексы $g, g', \dots$ для ионов в слое, находящемся над слоем ионов марганца (красные крестики на рис. 1). Индексами $l, l', \dots$ будем нумеровать положения узлов тех ионов Te^{2-} , которые находятся ниже слоя ионов марганца (синие кружки на рис. 1).

Спин-орбитали $|\Psi_{g\sigma}^{(p)}\rangle$ и $|\Psi_{l\sigma}^{(p)}\rangle$, возникающие при расщеплении термов конфигураций $5p^6$ ионов Te^{2-} , находящихся в узлах g и l , под влиянием поля тригональной симметрии (точечная группа C_{3v}) и СОВ, как и в модели BNZ (Bernevig–Hughes–Zhang) [19–22], записываются в виде

$$\begin{aligned} |\Psi_{g\uparrow}^{(p)}\rangle &= |g; 1 \uparrow\rangle, & |\Psi_{g\downarrow}^{(p)}\rangle &= |g; -1 \downarrow\rangle, \\ |\Psi_{l\uparrow}^{(p)}\rangle &= |l; 1 \uparrow\rangle, & |\Psi_{l\downarrow}^{(p)}\rangle &= |l; -1 \downarrow\rangle. \end{aligned} \quad (5)$$

В правых сторонах этих равенств кет-вектора обозначают центрированную на узлах g или l p -волновую функцию с заданными значениями проекций орбитального момента ± 1 и спина.

Учитывая, что спин-орбитали ионов Te^{2-} образуют две подсистемы электронных p состояний, запишем для них гамильтониан H_p в виде

$$\begin{aligned} \hat{H}_p &= \sum_{g\sigma} \varepsilon_p p_{1g\sigma}^+ p_{1g\sigma} + \sum_{l\sigma} \varepsilon_p p_{2l\sigma}^+ p_{2l\sigma} + \\ &+ \sum_{gg'\sigma} t_{gg'}^p p_{1g\sigma}^+ p_{1g'\sigma} + \sum_{ll'\sigma} t_{ll'}^p p_{2l\sigma}^+ p_{2l'\sigma} + \\ &+ \sum_{gl\sigma} \{t_{gl}^p p_{1g\sigma}^+ p_{2l\sigma} + \text{h.c.}\}. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь суммирование по индексам g и l означает суммирование по узлам ионов теллура, находящихся в верхней и нижней плоскости относительно плоскости ионов марганца соответственно. Операторы $p_{1g\sigma}^+$ ($p_{1g\sigma}$) являются операторами рождения (уничтожения) p электрона на узле g с проекцией спина $\sigma = \pm 1/2$. Аналогичное обозначение (при замене индекса g на индекс l) используется для электронов, занимающих спин-орбитали в нижней плоскости ионов теллура. Энергия p спин-орбитали обозначена посредством ε_p . $t_{gg'}^p$ ($t_{ll'}^p$) – интегралы перескоков p электрона между ионами теллура, находящимися в верхней (нижней) плоскости и занимающими узлы с номерами g, g' (l, l') соответственно. Интеграл перескока t_{gl}^p определяет интенсивность процессов перемешивания электронных спин-орбиталей, находящихся на ионах теллура из разных слоев.

Важную роль в формировании нетривиальной топологии энергетической структуры рассматриваемой системы играют процессы ковалентного смешивания (гибридизации) спин-орбиталей ионов Te^{2-} и спин-орбиталей ионов Mn^{2+} . Интенсивность таких процессов определяется интегралом перескока электронов между отмеченными группами состояний. При этом принципиальное значение приобретает не столько абсолютная величина отмеченных интегралов, сколько их зависимость от направления перескока.

При учете процессов $p-d$ гибридизации только между ближайшими ионами Mn^{2+} и Te^{2-} оператор ковалентного смешивания запишется в виде

$$\begin{aligned} \hat{T}_{pd} &= \sum_{f\delta\sigma} \{t_{pd}^\sigma(\delta) d_{f\sigma}^+ p_{1f+\delta\sigma} + \text{h.c.}\} + \\ &+ \sum_{f\gamma\sigma} \{t_{pd}^\sigma(\gamma) d_{f\sigma}^+ p_{2f+\gamma\sigma} + \text{h.c.}\}. \end{aligned} \quad (7)$$

Здесь введены векторы δ и γ , соединяющие ионы марганца с ближайшими ионами теллура, находящимися в верхней и нижней плоскости рассматриваемой трехслойки соответственно.

Параметрами гибридизации служат матричные элементы оператора кинетической энергии $\hat{T}$

$$t_{pd}^\sigma(\delta) = \langle \Psi_{f\sigma}^{(d)} | \hat{T} | \Psi_{f+\delta,\sigma}^{(p)} \rangle, \quad (8)$$

$$t_{pd}^\sigma(\gamma) = \langle \Psi_{f\sigma}^{(d)} | \hat{T} | \Psi_{f+\gamma,\sigma}^{(p)} \rangle. \quad (9)$$

Вычисления показывают, что их зависимость от векторов δ и γ имеет вид

$$t_{pd}^\sigma(\delta) = t_{pd} \begin{cases} (1 - i\eta_\sigma\sqrt{3})/2, & \delta = (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)/3, \\ -1, & \delta = (\mathbf{a}_1 + 2\mathbf{a}_2)/3, \\ (1 + i\eta_\sigma\sqrt{3})/2, & \delta = -(2\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)/3, \end{cases} \quad (10)$$

$$t_{pd}^\sigma(\gamma) = t_{pd} \begin{cases} -(1 + i\eta_\sigma\sqrt{3})/2, & \gamma = (2\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)/3, \\ 1, & \gamma = -(\mathbf{a}_1 + 2\mathbf{a}_2)/3, \\ -(1 - i\eta_\sigma\sqrt{3})/2, & \gamma = (\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1)/3. \end{cases} \quad (11)$$

В этих формулах $\mathbf{a}_1$ и $\mathbf{a}_2$ вектора элементарных трансляций, показанные на рис. 1.

Кроме процессов ковалентного смешивания p и d состояний, существенным является учет обменной связи между этими фермионами

$$\hat{J}_{pd} = - \sum_{f\delta\sigma} J p_{1f+\delta\sigma}^+ (\mathbf{S}_f \boldsymbol{\tau}_{\sigma\sigma'}) p_{1f+\delta\sigma'} - \sum_{f\gamma\sigma} J p_{2f+\gamma\sigma}^+ (\mathbf{S}_f \boldsymbol{\tau}_{\sigma\sigma'}) p_{2f+\gamma\sigma'}, \quad (12)$$

где J – параметр обменного взаимодействия, а $\mathbf{S}_f$ – векторный квазиспиновый оператор, компоненты которого определяются выражениями

$$S_f^x = (X_f^{\uparrow\downarrow} + X_f^{\downarrow\uparrow})/2, \quad S_f^y = (X_f^{\uparrow\downarrow} - X_f^{\downarrow\uparrow})/(2i), \\ S_f^z = (X_f^{\uparrow\uparrow} - X_f^{\downarrow\downarrow})/2. \quad (13)$$

Операторы Хаббарда X_f^{nm} [23–25] описывают переходы ионов в узлах с номерами f из состояния $|f, m\rangle$ в состояние $|f, n\rangle$. В (12) $\boldsymbol{\tau}_{\sigma\sigma'}$ – вектор, компонентами которого являются матричные элементы матриц Паули $\tau_{\sigma\sigma'}^x, \tau_{\sigma\sigma'}^y, \tau_{\sigma\sigma'}^z$.

Суммируя сказанное, получаем гамильтониан трехслойки $Te-Mn-Te$

$$\hat{H} = \hat{H}_d + \hat{H}_p + \hat{T}_{pd} + \hat{J}_{pd}. \quad (14)$$

3. Энергетическая структура $Te-Mn-Te$. При нахождении спектра фермиевских состояний трехслойки $Te-Mn-Te$ и вычислении топологического индекса получающейся энергетической структуры примем во внимание известные свойства $MnBi_2Te_4$, влияющие на выбор соотношений между параметрами гамильтониана (14):

1. В пределах одного слоя магнитные моменты ионов Mn^{2+} при низких температурах упорядочены ферромагнитно, тогда как моменты этих ионов из соседних слоев ориентированы противоположно по отношению друг к другу.

2. Наличие фрустрированных обменных связей, близких к критическим значениям [11], между ионами марганца, находящимися в одном слое и не являющимися ближайшими соседями.

3. Диэлектрический характер основного состояния $MnBi_2Te_4$ при том, что электронная конфигурация $(3d^5)$ ионов марганца характеризуется нечетным числом электронов.

Если механизм прямого гейзенберговского обмена мог бы дать объяснение ферромагнитной связи между ближайшими ионами Mn^{2+} из одного слоя, то интерпретация второго свойства в рамках такой концепции невозможна.

Обычный зонный подход представляется проблематичным, если учитывается третье свойство.

Отмеченные затруднения обуславливают использование подхода, основанного на предположении о наличии сильных электронных корреляций (СЭК) в подсистеме ионов марганца. В основу такого предположения положены следующие утверждения:

1. Точный результат Нагаоки [26] о том, что в модели Хаббарда в пределе $U \rightarrow \infty$ основное состояние системы с одной дыркой (число электронов $N_e = N - 1$) является ферромагнитным.

2. Поскольку в $Te-Mn-Te$ концентрация $n_d \simeq 1$, то ферромагнитное состояние в слое ионов Mn^{2+} реализуется по сценарию, соответствующему режиму сильных электронных корреляций $U \gg |t_{ff'}^d|$. При этом возникновение фрустрированных связей представляется вполне естественным, поскольку во втором порядке теории возмущений по параметру $|t_{ff'}^d|/U$ по механизму Андерсона возникает антиферромагнитная связь.

3. Данные первопринципных расчетов [5, 6] по электронной структуре $MnBi_2Te_4$ приводят к значениям параметра хаббардовского отталкивания для электронов ионов марганца $U \simeq (4-5)$ эВ.

Учитывая электрон-дырочную симметрию гамильтониана Хаббарда $\hat{H}_d$, воспользуемся дырочным представлением. Поскольку концентрация дырок n_d в d подсистеме в расчете на одну ячейку не превышает 1, то в режиме СЭК, когда $U \gg |t_{ff'}^d|$ [27–29], актуальной является нижняя подзона фермионов Хаббарда.

Состояния верхней хаббардовской подзоны обладают большой энергией и их заселенность незначительна. Влияние процессов виртуальных переходов в эти состояния можно учесть на основе теории возмущений по параметрам малости $|t_{ff'}^d|/U \ll 1$ и $|t_{pd}|/U \ll 1$. Ниже при решении задачи о спектре возбуждений и ферромагнитном состоянии магнитных

моментов ионов марганца ограничимся приближением, когда отмеченные процессы не учитываются.

Переходя к представлению квазиимпульса

$$p_{1f+\delta\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ik(f+\delta)} p_{1k\sigma}, \quad (15)$$

$$p_{2f+\gamma\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ik(f+\gamma)} p_{2k\sigma}, \quad (16)$$

$$X_f^{0\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikf} X_{k\sigma}, \quad (17)$$

получим

$$\begin{aligned} \hat{H}_d &= \sum_{k\sigma} (\varepsilon_d + t_{dk}) X_{k\sigma}^+ X_{k\sigma}, \\ \hat{H}_p &= \sum_{k\sigma} [\varepsilon_p(k) (p_{1k\sigma}^+ p_{1k\sigma} + p_{2k\sigma}^+ p_{2k\sigma})] - \\ &\quad - \sum_{k\sigma} [t_{12}(k) p_{1k\sigma}^+ p_{2k\sigma} + \text{h.c.}], \\ \hat{T}_{pd} &= - \sum_{k\sigma} (t_{1k\sigma} X_{k\sigma}^+ p_{1k\sigma} + t_{2k\sigma} X_{k\sigma}^+ p_{2k\sigma} + \text{h.c.}), \\ \hat{J}_{pd} &= - \frac{3J}{N} \sum_{\lambda=1}^2 \sum_{fkq\sigma\sigma'} e^{if(q-k)} p_{\lambda k\sigma}^+ (\mathbf{S}_f \boldsymbol{\tau}_{\sigma\sigma'}) p_{\lambda q\sigma'}, \end{aligned} \quad (18)$$

где введены следующие обозначения

$$\begin{aligned} t_{dk} &= 6t_d \gamma_{1k}, \quad \varepsilon_p(k) = -\varepsilon_p - 6t_p \gamma_{1k}, \\ \gamma_{1k} &= \{\cos k_1 + \cos k_2 + \cos(k_1 + k_2)\}/3, \\ t_{12}(k) &= t_{12} \{\varphi_{1k} + \varphi_{2k} + \varphi_{3k}\}, \\ t_{1k\sigma} &= t_{pd} \{r_\sigma \varphi_{1k} - \varphi_{2k} + r_\sigma^* \varphi_{3k}\}, \quad t_{2k\sigma} = -t_{1k\bar{\sigma}}, \\ \varphi_{1k} &= \exp[i(k_1 - k_2)/3], \quad \varphi_{2k} = \exp[i(k_1 + 2k_2)/3], \\ \varphi_{3k} &= \exp[-i(2k_1 + k_2)/3], \quad r_\sigma = (1 - i\eta_\sigma \sqrt{3})/2. \end{aligned} \quad (19)$$

Здесь t_d и t_p – интегралы перескоков электронов между спин-орбиталями ближайших ионов Mn^{2+} и Te^{2-} , находящихся в одном слое треугольной решетки, соответственно.

Важная особенность фурье-образов интегралов $p-d$ гибридизации $t_{1k\sigma}$ и $t_{2k\sigma}$ заключается в том, что значение спиновой переменной влияет на характер их квазиимпульсной зависимости. Это обстоятельство в условиях перекрытия нижней дырочной d подзоны с подзоной p состояний приводит к нечетному значению числа Черна для энергетической структуры и реализации нетривиальной топологии при наличии ферромагнитного упорядочения.

Квазиимпульсная зависимость интегралов перескока электрона между ближайшими спин-орбиталями из разных слоев ионов Te^{2-} трехслойки

Te-Mn-Te описывается $t_{12}(k)$, при этом t_{12} – амплитуда отмеченного процесса.

Для вычисления энергетической структуры трехслойки, получения уравнений самосогласования и определения ее топологических свойств введем трехкомпонентный оператор поля

$$\hat{\Psi}_{k\sigma}^+ = (p_{1k\sigma}^+, X_{k\sigma}^+, p_{2k\sigma}^+) \quad (20)$$

и определим двухвременную запаздывающую [30, 31] матричную функцию Грина (ФГ) $\hat{D}_{k\sigma}(\omega)$ в соответствии с преобразованием Фурье

$$\langle\langle \hat{\Psi}_{k\sigma}(t) | \hat{\Psi}_{k\sigma}^+(t') \rangle\rangle = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')} \hat{D}_{k\sigma}(\omega). \quad (21)$$

Операторы поля $\hat{\Psi}_{k\sigma}$ и $\hat{\Psi}_{k\sigma}^+$ берутся в гейзенберговском представлении в моменты времени t и t' .

Используя метод проецирования Цванцига–Мори [32, 33], получим, что ФГ удовлетворяет уравнению

$$[\omega \hat{I} - \hat{M}_\sigma(k)] \hat{D}_{k\sigma}(\omega) = \hat{P}_\sigma, \quad (22)$$

где $\hat{P}_\sigma$ – диагональная матрица с элементами $(1, N_{0\sigma}, 1)$, $N_{0\sigma} = \langle X_f^{00} + X_f^{\sigma\sigma} \rangle$.

В (22) $\hat{I}$ – единичная матрица, а $\hat{M}_\sigma(k)$ имеет вид

$$\hat{M}_\sigma(k) = \begin{pmatrix} \varepsilon_{p\sigma}(k) & -t_{1k\sigma}^* & -t_{12}(k) \\ -N_{0\sigma} t_{1k\sigma} & \varepsilon_{dk\sigma} & -N_{0\sigma} t_{2k\sigma} \\ -t_{12}^*(k) & -t_{2k\sigma}^* & \varepsilon_{p\sigma}(k) \end{pmatrix}, \quad (23)$$

где $\varepsilon_{p\sigma}(k) = \varepsilon_p(k) - 2J_0 M_\sigma$, $J_0 = 3J$, $\sigma = \pm 1/2$, $M = \langle S_f^z \rangle$, $\varepsilon_{dk\sigma}$ – энергия фермионов Хаббарда в d подсистеме, ренормированная за счет кинематического взаимодействия

$$\varepsilon_{dk\sigma} = \varepsilon_d + N_{0\sigma} t_{dk} - \frac{1}{N_{0\sigma} N} \sum_q t_q \langle X_{q\bar{\sigma}}^+ X_{q\sigma} \rangle. \quad (24)$$

Из уравнения (22) находим три ветви спектра:

$$\begin{aligned} E_{1k\sigma} &= -W_{k\sigma}/2 - \lambda_{k\sigma} - a_{k\sigma}/3, \\ E_{2k\sigma} &= -W_{k\sigma}/2 + \lambda_{k\sigma} - a_{k\sigma}/3, \\ E_{3k\sigma} &= W_{k\sigma} - a_{k\sigma}/3. \end{aligned} \quad (25)$$

Входящие в эти формулы функции квазиимпульса и проекции спина:

$$\begin{aligned} W_{k\sigma} &= Z_{k\sigma} - P_{k\sigma}/Z_{k\sigma}, \\ Z_{k\sigma} &= \left(\sqrt{Q_{k\sigma}^2 + P_{k\sigma}^3} - Q_{k\sigma} \right)^{1/3}, \\ \lambda_{k\sigma} &= \sqrt{-3P_{k\sigma} - 3W_{k\sigma}^2/4} \end{aligned} \quad (26)$$

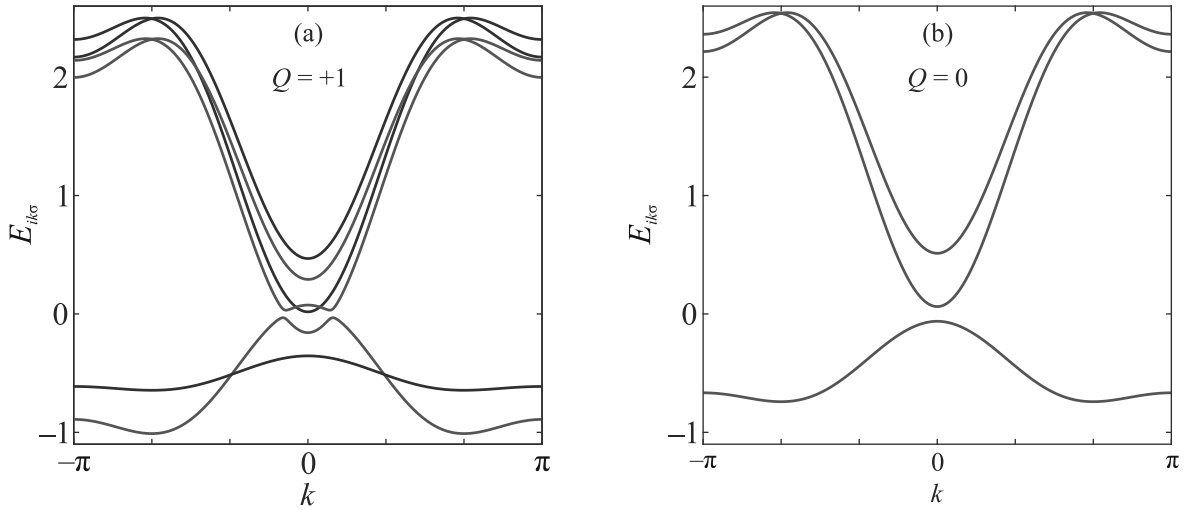


Рис. 2. (Цветной онлайн) Спектр фермиевских возбуждений для двух состояний: (а) – ненасыщенный ферромагнетизм (красные линии соответствуют ветвям спектра с $\sigma = +1/2$, синие линии для $\sigma = -1/2$); (б) – парафаза, ветви вырождены по проекции спина. Вычисления проводились при значениях параметров: $t_p = 0.25$, $t_d = 0.15$, $t_{pd} = 0.05$, $J = 0.1$, $t_{12} = 0.075$, $\Delta_0 = 0.1$ – параметр, определяющий перекрытие затравочных d и p зон. При этом $n_d = 0.97$, $M = 0.28$. Для феррофазы число Черна $Q = 1$ (топология энергетической структуры нетривиальна). Для парафазы $Q = 0$ (топология энергетической структуры тривиальна)

связаны с исходными энергетическими величинами:

$$\begin{aligned} P_{k\sigma} &= (b_{k\sigma} - a_{k\sigma}^2/3)/3, \\ Q_{k\sigma} &= (c_{k\sigma} + 2a_{k\sigma}^3/27 - a_{k\sigma}b_{k\sigma}/3)/2, \\ a_{k\sigma} &= -(2\varepsilon_{p\sigma}(k) + \varepsilon_{dk\sigma}), \quad b_{k\sigma} = 2\varepsilon_{p\sigma}(k)\varepsilon_{dk\sigma} + \\ &+ \varepsilon_{p\sigma}^2(k) - |t_{12}(k)|^2 - N_{0\sigma}(|t_{1k\sigma}|^2 + |t_{2k\sigma}|^2), \quad (27) \\ c_{k\sigma} &= -\varepsilon_{p\sigma}^2(k)\varepsilon_{dk\sigma} + N_{0\sigma}[t_{12}(k)t_{1k\sigma}t_{2k\sigma}^* + \text{h.c.}] + \\ &+ \varepsilon_{dk\sigma}|t_{12}(k)|^2 + \varepsilon_{p\sigma}(k)N_{0\sigma}(|t_{1k\sigma}|^2 + |t_{2k\sigma}|^2). \end{aligned}$$

Для замыкания уравнений самосогласования использовались найденные из (22) компоненты ФГ:

$$\begin{aligned} D_{11}^\sigma(k, \omega) &= \frac{(\omega - \varepsilon_{dk\sigma})(\omega - \varepsilon_{pk\sigma}) - N_{0\sigma}|t_{2k\sigma}|^2}{\det_3^\sigma(k, \omega)}, \\ D_{22}^\sigma(k, \omega) &= N_{0\sigma} \frac{(\omega - \varepsilon_{pk\sigma})^2 - |t_{12}(k)|^2}{\det_3^\sigma(k, \omega)}, \quad (28) \\ D_{33}^\sigma(k, \omega) &= D_{11}^\sigma(k, \omega), \end{aligned}$$

где $\det_3^\sigma(k, \omega)$ – детерминант третьего порядка матрицы $[\omega\hat{I} - \hat{M}_\sigma(k)]$.

С помощью этих функций по спектральной теореме получаем необходимые выражения для средних

$$\begin{aligned} N_\sigma &= \langle X_f^{\sigma\sigma} \rangle = \frac{N_{0\sigma}}{N} \sum_q \frac{(E_{1q\sigma} - \varepsilon_{pq\sigma})^2 - |t_{12}(q)|^2}{\lambda_{q\sigma}(3W_{q\sigma} + 2\lambda_{q\sigma})}, \\ N_{p\sigma} &= \frac{2}{N} \sum_q \frac{(E_{1q\sigma} - \varepsilon_{dq\sigma})(E_{1q\sigma} - \varepsilon_{pq\sigma}) - N_{0\sigma}|t_{2q\sigma}|^2}{\lambda_{q\sigma}(3W_{q\sigma} + 2\lambda_{q\sigma})}, \end{aligned}$$

где $N_{p\sigma}$ – узловая концентрация дырок с проекцией спина σ в p подсистеме, а $n_d = N_\uparrow + N_\downarrow$ – полная концентрация фермионов Хаббарда в расчете на один узел.

Полученные уравнения позволяют проанализировать ферромагнитную и парамагнитную фазы и установить изменение топологии энергетического спектра при изменении магнитного состояния системы.

4. Топологический индекс энергетической структуры фермионных состояний Те-Мн-Те. Как известно, топологический индекс (число Черна) определяется выражением

$$Q = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 \int_{-\pi}^{\pi} dk_2 B(k), \quad (29)$$

в котором кривизна Берри $B(k)$

$$B(k) = \frac{\partial A_2(k)}{\partial k_1} - \frac{\partial A_1(k)}{\partial k_2} \quad (30)$$

находится в результате дифференцирования по квазиимпульсам величин $A_1(k)$ и $A_2(k)$, получаемых в результате усреднения по блоховскому состоянию операторов $-i\partial/\partial k_1$ и $-i\partial/\partial k_2$ соответственно [34]:

$$A_{1(2)}(k) = -i\langle \psi_k | \frac{\partial}{\partial k_{1(2)}} | \psi_k \rangle. \quad (31)$$

Для установления связи кривизны Берри с энергетическими величинами решим задачу о нахож-

дении собственных векторов $\mathbf{R}_{k\sigma}$ (см., например, [35, 36])

$$\mathbf{R}_{k\sigma} \equiv (u_{k\sigma}, v_{k\sigma}, z_{k\sigma}) \quad (32)$$

матрицы $\hat{M}_\sigma(k)$, определенной в (23),

$$\hat{M}_\sigma(k)\mathbf{R}_{k\sigma} = E_{k\sigma}\mathbf{R}_{k\sigma}. \quad (33)$$

После несложных вычислений получаем выражение для кривизны Берри, соответствующей нижней заполненной зоне

$$B_\sigma(k) = i \left[\frac{\partial v_{k\sigma}^*}{\partial k_2} \frac{\partial v_{k\sigma}}{\partial k_1} - \frac{\partial v_{k\sigma}^*}{\partial k_1} \frac{\partial v_{k\sigma}}{\partial k_2} \right] + \\ + i \left[\frac{\partial z_{k\sigma}^*}{\partial k_2} \frac{\partial z_{k\sigma}}{\partial k_1} - \frac{\partial z_{k\sigma}^*}{\partial k_1} \frac{\partial z_{k\sigma}}{\partial k_2} \right], \quad (34)$$

где

$$v_{k\sigma} = \frac{\Phi_{k\sigma}}{\sqrt{1 + |\Phi_{k\sigma}|^2 + |\Psi_{k\sigma}|^2}}, \\ z_{k\sigma} = \frac{\Psi_{k\sigma}}{\sqrt{1 + |\Phi_{k\sigma}|^2 + |\Psi_{k\sigma}|^2}}. \quad (35)$$

Входящие в эти выражения функции определены следующим образом

$$\Phi_{k\sigma} = N_{0\sigma} \frac{t_{12}^*(k)t_{2k\sigma} - t_{1k\sigma}(E_{1k\sigma} - \varepsilon_{dk\sigma})}{D_{1k\sigma}}, \quad (36)$$

$$\Psi_{k\sigma} = \frac{N_{0\sigma}t_{1k\sigma}t_{2k\sigma}^* - t_{12}^*(k)(E_{1k\sigma} - \varepsilon_{dk\sigma})}{D_{1k\sigma}}, \quad (37)$$

$$D_{k\sigma} = (E_{1k\sigma} - \varepsilon_{dk\sigma})[E_{1k\sigma} - \varepsilon_{p\sigma}(k)] - N_{0\sigma}|t_{2k\sigma}|^2. \quad (38)$$

Применение полученных выражений для ферро- и парафазы показывает, что в первом случае топология энергетической структуры фермиевского спектра является нетривиальной ($Q = 1$), тогда как во втором случае $Q = 0$ и топология тривиальна.

Данный результат, продемонстрированный на рис. 2, говорит о сильной взаимосвязи между магнетизмом и топологией в MnBi_2Te_4 .

5. Заключение. Показано, что в ван-дер-ваальсовом материале MnBi_2Te_4 эффекты $p-d$ ковалентного смешивания спин-орбитальных электронных состояний ионов Mn^{2+} и Te^{2-} в трехслойках Te-Mn-Te имеют принципиальное значение для формирования нетривиальной топологии энергетической структуры в условиях дальнего магнитного порядка, если:

1. Совместное влияние кристаллического поля и спин-орбитального взаимодействия приводит к такой иерархии крамеровских дублетов расщепленной $3d^5$ электронной конфигурации ионов Mn^{2+} , что

наполовину заполненный спин-орбитальный дублет характеризуется значениями: $\bar{L}_z \simeq 2$, $\bar{s}_z \simeq 1/2$ и $\bar{L}_z \simeq -2$, $\bar{s}_z \simeq -1/2$.

2. Верхним спин-орбитальным дублетом, сформированным из электронных конфигураций $5p^6$ ионов Te^{2-} под влиянием отмеченных выше взаимодействий, как и в модели ВНЗ, соответствуют состояния $|1 \uparrow\rangle$ и $|-1 \downarrow\rangle$.

3. Внутриатомное кулоновское отталкивание электронов в ионах марганца достаточно сильно для реализации режима сильных электронных корреляций. В этом случае благодаря кинематическому взаимодействию фермионов Хаббарда [37] в слое ионов марганца устанавливается ферромагнитное состояние, которое инициирует расщепление спиновых p подзон. Это способствует реализации условий, когда возникает перекрытие по энергии верхней подзоны фермионов Хаббарда с p подзонами фермионов, связанных со спин-орбиталями ионов Te^{2-} . При этом число Черна приобретает значение $+1$, соответствующее нетривиальной топологии энергетической структуры.

4. В парамагнитной фазе перекрытие зон исчезает и топология энергетической структуры становится тривиальной. Эти факторы устанавливают взаимосвязь между ферромагнитным упорядочением магнитных моментов в слое ионов марганца с топологией энергетической структуры Te-Mn-Te .

Следует подчеркнуть, что в соответствие с характером спин-орбиталей ионов марганца магнитные моменты этих ионов в упорядоченной фазе ориентируются перпендикулярно слоям. В этом случае анизотропия является сильной, что приводит к изинго-подобному поведению магнитного слоя ионов марганца. При этом процессы перескоков фермионов между отмеченными слоями приведут по механизму Андерсона к установлению антиферромагнитной связи между магнитными моментами из разных слоев. Отмеченная картина полностью соответствует данным эксперимента.

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда # 23-22-10021, <https://rscf.ru/project/23-22-10021/> и Красноярского краевого фонда науки.

1. R. Yu, W. Zhang, H.-J. Zhang, S.-C. Zhang, X. Dai, and Z. Fang, *Science* **329**, 61 (2010).
2. X.-L. Qi and S.-C. Zhang, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1057 (2011).
3. C.-Z. Chang, J. Zhang, X. Feng et al. (Collaboration), *Science* **340**, 167 (2013).

4. D. Zhang, M. Shi, T. Zhu, D. Xing, H. Zhang, and J. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 206401 (2019).
5. M. M. Otrokov, I. I. Klimovskikh, H. Bentmann et al. (Collaboration), *Nature* **576**, 416 (2019).
6. J. Li, Y. Li, S. Du, Z. Wang, B.-L. Gu, S.-C. Zhang, K. He, W. Duan, and Y. Xu, *Sci. Adv.* **5**, eaaw5685 (2019).
7. Y. Gong, J. Guo, J. Li et al. (Collaboration), *Chinese Phys. Lett.* **36**, 076801 (2019).
8. R. S. K. Mong, A. M. Essin, and J. E. Moore, *Phys. Rev. B* **81**, 245209 (2010).
9. D. S. Lee, T.-H. Kim, C.-H. Park, C.-Y. Chung, Y. S. Lim, W.-S. Seo, and H.-H. Park, *CrystEngComm* **15**, 5532 (2013).
10. Y. Li, Z. Jiang, J. Li, S. Xu, and W. Duan, *Phys. Rev. B* **100**, 134438 (2019).
11. B. Li, J.-Q. Yan, D. M. Pajerowski, E. Gordon, A.-M. Nedi, Y. Sizyuk, L. Ke, P. P. Orth, D. Vaknin, and R. J. McQueeney, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 167204 (2020).
12. H.-P. Sun, C. M. Wang, S.-B. Zhang, R. Chen, Y. Zhao, C. Liu, Q. Liu, C. Chen, H.-Z. Lu, and X. C. Xie, *Phys. Rev. B* **102**, 241406 (2020).
13. M. M. Otrokov, I. P. Rusinov, M. Blanco-Rey, M. Hoffmann, A. Yu. Vyazovskaya, S. V. Ereemeev, A. Ernst, P. M. Echenique, A. Arnau, and E. V. Chulkov, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 107202 (2019).
14. А. М. Шикин, Д. А. Естюнин, Д. А. Глазкова, С. О. Фильнов, И. И. Климовских, *Письма в ЖЭТФ* **115**, 241 (2022).
15. С. А. Альтшулер, Б. М. Козырев, *Электронный парамагнитный резонанс соединений элементов переходных групп*, Наука, М. (1972).
16. K. W. H. Stewens, *Proc. Phys. Soc. A* **65**, 209 (1952).
17. К. Бальхаузен, *Введение в теорию поля лигандов*, Мир, М. (1964).
18. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. A* **276**, 238 (1963).
19. B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, *Science* **314**, 1757 (2006).
20. X. Dang, J. D. Burton, A. Kalitsov, J. P. Velev, and E. Y. Tsymbal, *Phys. Rev. B* **90**, 155307 (2014).
21. В. В. Вальков, *Письма в ЖЭТФ* **111**, 772 (2020).
22. В. В. Вальков, *Письма в ЖЭТФ* **114**, 812 (2021).
23. J. Hubbard, *Proc. R. Soc. A* **285**, 542 (1965).
24. Р. О. Зайцев, *ЖЭТФ* **68**, 207 (1975).
25. Р. О. Зайцев, *ЖЭТФ* **70**, 1100 (1976).
26. Y. Nagaoka, *Phys. Rev.* **147**, 392 (1966).
27. Ю. А. Изюмов, *УФН* **161**(11), 1 (1991).
28. Ю. А. Изюмов, *УФН* **165**, 403 (1995).
29. Ю. А. Изюмов, *УФН* **167**, 465 (1997).
30. Н. Н. Боголюбов, *Изв. Ан. СССР. Сер. физ.* **VI**(1), 77 (1947).
31. Д. Н. Зубарев *Неравновесная статистическая термодинамика*, Наука, М. (1971).
32. R. Zwanzig, *Phys. Rev.* **124**, 983 (1961).
33. H. Mori, *Prog. Theor. Phys.* **33**, 423 (1965).
34. D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 405 (1982).
35. J. K. Asboth, L. Oroszlany, and A. Palyi, *A Short Course on Topological Insulators*, The Series Lecture Notes in Physics, Springer, Heidelberg (2016), v. 919.
36. В. В. Вальков, В. А. Мицкан, А. О. Злотников, М. С. Шустин, С. В. Аксенов, *Письма в ЖЭТФ* **110**, 126 (2019).
37. Р. О. Зайцев, *ЖЭТФ* **123**, 325 (2003).

Спиновая диффузия и колебания намагниченности при высокочастотной спиновой инжекции

Н. Г. Бебенин¹⁾

Институт физики металлов имени М. Н. Михеева Уральского отделения РАН, 620108 Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 20 июля 2023 г.

После переработки 27 июля 2023 г.

Принята к публикации 28 июля 2023 г.

Теоретически рассматривается частотная зависимость неравновесной намагниченности электронного газа при инжекции спина из полуметаллического ферромагнетика в немагнитный материал. Показано, что в высокочастотной области спиновая инжекция приводит к появлению волн неравновесной намагниченности, которые затухают на длине, существенно меньшей, чем длина спиновой диффузии, что ведет к снижению эффективности спиновой инжекции.

DOI: 10.31857/S1234567823170056, EDN: jznunv

Спиновая электроника (спинтроника) – одна из быстро развивающихся областей электроники, посвященных наноструктурам и наноустройствам нового поколения [1–3]. Одной из задач, рассматриваемой в спинтронике, является создание спинового тока (потока намагниченности) в немагнитном материале, в частности, инжекция спин-поляризованных электронов из ферромагнитного материала в немагнитный – полупроводник или металл. Интерес к этой проблеме обусловлен тем, что спиновая инжекция является одним из простейших примеров переноса спина. Электрический ток и спиновый ток в большинстве случаев считаются не зависящими от времени. В настоящее время, однако, электронные устройства работают на частотах 3 ГГц и выше [3], что требует исследования процессов переноса магнитного момента в области высоких частот. Таких работ не много (см., например, статьи [4, 5] и ссылки в них), в них с помощью численных расчетов рассматриваются достаточно сложные наноструктуры. Судить об общих закономерностях спиновой инжекции в высокочастотной области при этом затруднительно.

Цель настоящей работы состоит в исследовании неравновесной намагниченности электронов, инжектированных в немагнитный материал, в высокочастотной области. Полученные в рамках простой модели уравнения решаются аналитически, что делает анализ простым, понятным и, возможно, полезным для экспериментаторов.

Предположим, что спиновым инжектором, занимающим область пространства $z < 0$, является полуметаллический (half-metallic) ферромагнетик. В та-

ком материале все электроны находятся в одном спиновом состоянии, так что намагниченность от координаты не зависит; типичными представителями этого класса кристаллов являются некоторые сплавы Гейслера [6, 7]. При $z > 0$ расположен немагнитный материал. Будем считать, что намагниченность как в ферромагнетике, так и в немагнитном материале направлена вдоль оси x системы координат. Перпендикулярно границе раздела сред течет переменный электрический ток с частотой f . Зависимость намагниченности M_x электронов проводимости определяется потоком намагниченности J_{zx} вдоль оси z и релаксацией. В полуметаллическом ферромагнетике перенос заряда осуществляется электронами только с одним направлением спина, поэтому при $z < 0$ поток намагниченности целиком определяется электрическим током и, следовательно, поток J_{zx} можно считать заданной функцией времени. В немагнитном материале поток намагниченности зависит как от дрейфовой скорости электронов V_z , так и от спиновой диффузии: $J_{zx} = V_z M_x - D \frac{\partial M_x}{\partial z}$, где D – коэффициент диффузии. Записывая условие непрерывности и беря релаксационный член в виде $-\frac{M_x}{\tau_s}$, где τ_s – время спиновой релаксации, получаем известное уравнение (см., например, [1]):

$$\tau_s \frac{\partial M_x}{\partial t} = L_D^2 \frac{\partial^2 M_x}{\partial z^2} - l_d \frac{\partial M_x}{\partial z} - M_x, \quad (1)$$

где $L_D = \sqrt{D\tau_s}$ – диффузионная длина, а $l_d = V_z \tau_s$ – дрейфовая длина. Поскольку как l_d , так и M_x зависят от времени, при протекании переменного тока возбуждаются колебания намагниченности не только на этой, но и на кратных частотах. Если, однако, электрический ток не слишком сильный, что обыч-

¹⁾e-mail: bebenin@imp.uran.ru

но выполняется на эксперименте, то $l_d \ll l_D$. Считая это неравенство выполненным, мы не будем в дальнейшем учитывать второе слагаемое в правой части уравнения (1); тогда решение можно искать в привычном виде $M_x \sim \exp[i(kz - \omega t)]$, где $\omega = 2\pi f$. Подставляя это выражение в (1) (в котором $l_d = 0$), находим волновой вектор $k = k' + ik''$ как функцию ω : $L_D^2 k^2 + 1 = i\omega\tau_s$. Поскольку нас интересует решение, ограниченное при всех $z > 0$, следует выбрать решение, для которого $k'' > 0$:

$$\begin{aligned} k' L_D &= \left[\frac{(1 + \omega^2 \tau_s^2)^{1/2} - 1}{2} \right]^{1/2}, \\ k'' L_D &= \left[\frac{(1 + \omega^2 \tau_s^2)^{1/2} + 1}{2} \right]^{1/2}. \end{aligned} \quad (2)$$

Вещественное ограниченное при всех $z > 0$, решение уравнения (1) (при $l_d = 0$) можно тогда представить в следующем виде:

$$M_x(z, t) = C(\omega) e^{-k'' z} \cos(k' z - \omega t + \varphi), \quad (3)$$

где коэффициент $C(\omega)$ и сдвиг фазы $\varphi(\omega)$ определяются из граничных условий.

Уравнение (3) показывает, что переменный электрический ток, текущий через границу ферромагнетика и немагнитного материала возбуждает в последнем волны намагниченности, которые затухают на длине порядка $1/k''$.

Если выполнено условие $\omega\tau_s \ll 1$, действительная часть волнового вектора пропорциональна частоте: $k' = \omega\tau_s/(2L_D)$, а в высокочастотной области ($\omega\tau_s \gg 1$) $k' = \sqrt{\frac{\omega\tau_s}{2}}/L_D$. Отсюда следует, что если $\omega\tau_s \ll 1$, то фазовая скорость волны $v = \omega/k'$ от частоты не зависит и равна $v = 2L_D/\tau_s$. Ранее было показано [8], что именно с такой скоростью неравновесная намагниченность распространяется от границы раздела сред вглубь немагнитного материала при включении или выключении электрического тока. Если частота переменного тока столь велика, что выполнено условие $\omega\tau_s \gg 1$, то скорость волны $v = \sqrt{\frac{\omega\tau_s}{2}} \frac{2L_D}{\tau_s}$. Мнимая часть k'' волнового вектора мало отличается от $1/L_D$ при $\omega\tau_s \ll 1$, а если $\omega\tau_s \gg 1$, то $k'' = k' = \sqrt{\frac{\omega\tau_s}{2}}/L_D$.

Длина затухания волны, равная $1/k''$, оказывается много меньше L_D , если $\omega\tau_s \gg 1$, что приводит к снижению эффективности спиновой инжекции в области высоких частот.

При $\omega\tau_s \ll 1$ действительная часть волнового вектора много меньше $1/L_D$, так что на расстояниях порядка L_D , которые только и представляют интерес, зависимость намагниченности электрон-

ного газа от z остается экспоненциальной: $M_x \sim e^{-z/L_D} \cos(\omega t - \varphi)$. Волновой характер зависимости $M_x(z, t)$ проявляется наиболее ясно, если выполнено условие $\omega\tau_s \gg 1$, т.е. когда $k' = k''$, и, вероятно, только в этом случае он может быть обнаружен экспериментально. Легко видеть, что в этом случае волны намагниченности, описываемые уравнением (3), имеют такую же зависимость от частоты, как и хорошо известные температурные волны, см., например, [9].

Как отмечено выше, если спиновым инжектором является полуметаллический ферромагнетик, то поток намагниченности при $z < 0$ от z не зависит и является заданной функцией времени. Для определенности будем полагать $J_{zx}(z < 0, t) = J_0 \cos \omega t$. В немагнитном материале при $l_d \ll L_D$ поток намагниченности пропорционален производной от M_x по координате: $J_{zx} = -D \frac{\partial M_x}{\partial z} = -\frac{L_D^2}{\tau_s} \frac{\partial M_x}{\partial z}$. Считая магнитный поток непрерывной функцией при $z = 0$, находим $C(\omega)$ и сдвиг фазы φ , фигурирующие в уравнении (3): $C = \frac{J_0 \tau_s}{L_D [1 + (\omega\tau_s)^2]^{1/4}}$, $\varphi = 0$ при $\omega\tau_s \ll 1$ и $\varphi = \pi/4$, если $\omega\tau_s \gg 1$.

Полезно сделать численные оценки величин, фигурирующих в приведенных выше формулах. В табл. 1 представлены данные о длине спиновой диффузии L_D и времени спиновой релаксации τ_s для некоторых материалов спинтроники. В большинстве опубликованных работ приводятся только значения длины спиновой диффузии, причем результаты разных авторов сильно отличаются. О времени спиновой релаксации данных значительно меньше. Нами использовались данные тех публикаций, в которых приводятся как L_D , так и τ_s .

Таблица 1. Время спиновой релаксации τ_s и длина спиновой диффузии L_D

Материал	Температура	Время спиновой релаксации τ_s , и длина спиновой диффузии L_D
n -InSb $n_e = 1.2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$	77 K	1.5 нс, 25 мкм [10,11]
n -Si $n_e = 1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$	300 K	130 пс, 0.2 мкм [12]
p -Si $n_p = 1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$	300 K	122 пс, 0.148 нм [13]
Au	300 K	3 пс, 168 нм [14]
Ag	$\leq 300 \text{ K}$	$\sim 10 \text{ пс}$, $\sim 500 \text{ нм}$ [15]

В указанных полупроводниках τ_s порядка 10^{-9} – 10^{-10} с, а в золоте и серебре время спиновой релаксации существенно меньше. Отсюда следует, что описанное выше уменьшение длины спиновой диффузии и появление волн намагниченности мож-

но экспериментально обнаружить, например, при спиновой инжекции в InSb при частоте переменного тока порядка 1 ГГц. В кремнии аналогичная зависимость $M_x(z, t)$ должна иметь место на частотах порядка 10 ГГц. Кривые, представленные на рис. 1, хорошо иллюстрируют тот факт, что в высокочастотной области появляются волны неравновесной намагниченности, но они затухают на длине, существенно меньшей чем, при $f = 0$, т.е. спиновая инжекция является менее эффективной.

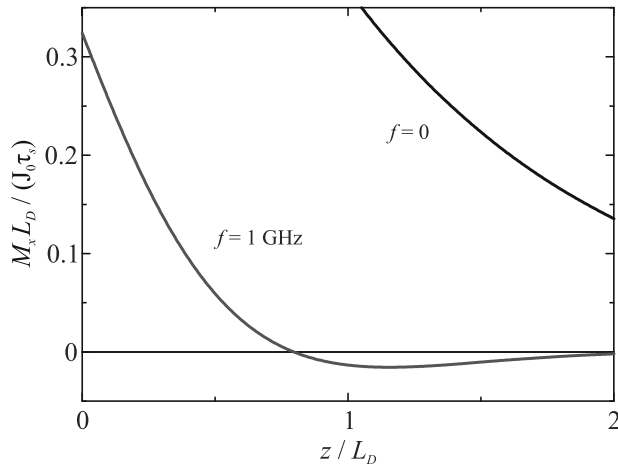


Рис. 1. (Цветной онлайн) Координатная зависимость намагниченности электронного газа в немагнитном материале при $f = 0$ и при частоте переменного тока $f = 1$ ГГц, $\omega t = \pi/4$. Время спиновой релаксации $\tau_s = 1.5$ нс

Обнаружение этих эффектов в металлических структурах требует существенно больших частот, на которых развитая выше теория может оказаться неприменимой.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема “Спин” # 122021000036-3).

1. *Spin Physics in Semiconductor*, ed. by M. I. Dyakonov, second edition, Springer International Publishing AG, Cham, Switzerland (2017).
2. S. Maekawa, S. O. Valenzuela, E. Saitoh, and T. Kimura, *Spin Current*, Oxford University Press, N.Y. (2017).
3. A. Hirohata, K. Yamada, Y. Nakatani, I.-L. Prejbeanu, B. Diény, P. Pirro, and B. Hillebrands, *J. Magn. Mater.* **509**, 166711 (2020).
4. A. I. Nikitchenko and N. A. Pertsev, *Phys. Rev. App.* **14**, 034022 (2020).
5. E. A. Karashtin and D. A. Tatarskiy, *J. Phys.: Condens. Matter.* **32**, 095303 (2020).
6. В. Ю. Ирхин, М. И. Кацнельсон, *УФН* **164**, 705 (1994).
7. В. В. Марченков, В. Ю. Ирхин, *ФММ* **122**, 1221 (2021).
8. N. G. Bebenin, *Solid State Electronics* **186**, 108174 (2021).
9. А. Н. Тихонов, А. А. Самарский, *Уравнения математической физики*, 5-е изд., стереотипное, Главная редакция физико-математической литературы издательства “Наука”, М. (1977), 736 с.
10. N. A. Viglin, V. V. Ustinov, S. O. Demokritov, A. O. Shorikov, N. G. Bebenin, V. M. Tselikhovskaya, T. N. Pavlov, and E. I. Patrakov, *Phys. Rev. B* **96**, 235303 (2017).
11. Н. А. Виглин, Ю. В. Никулин, В. М. Цвелиховская, Т. Н. Павлов, В. В. Пролядо, *ЖЭТФ* **134**, 866 (2022).
12. O. M. van’t Erve, A. L. Friedman, E. Cobas, C. H. Li, J. T. Robinson, and B. T. Jonker, *Nat. Nanotechnol.* **7**, 737 (2012).
13. E. Shikoh, K. Ando, K. Kubo, E. Saitoh, T. Shinjo, and M. Shiraishi, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 127201 (2013).
14. J.-H. Ku, J. Chang, H. Kim, and J. Eom, *Phys. Appl. Phys. Lett.* **88**, 172510 (2006).
15. H. Idzuchi, Y. Fukuma, and Y. Otani, *Physica E* **68**, 239 (2015).

***PT*-симметричная фотопроводимость, стимулированная микроволновым излучением, в гетероструктурах на основе топологической фазы $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$**

С. Н. Чмырь⁺, А. С. Казаков⁺, А. В. Галеева⁺, Д. Е. Долженко⁺, А. И. Арташкин⁺, А. В. Иконников⁺,
Н. Н. Михайлов*, С. А. Дворецкий*, М. И. Банников[×], Л. И. Рябова⁺, Д. Р. Хохлов^{+,×1)}

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

* Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия

[×] Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 5 июля 2023 г.

После переработки 29 июля 2023 г.

Принята к публикации 29 июля 2023 г.

В работе сообщается об обнаружении нового эффекта – *PT*-симметричной фотопроводимости при воздействии микроволнового излучения в гетероструктурах на основе толстых пленок $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ в области составов, соответствующих топологической фазе, при том, что отдельно симметрия по магнитному полю (*T*-симметрия) и по расположению пар потенциальных контактов (*P*-симметрия) не сохраняются. В аналогичных гетероструктурах на основе тривиальной фазы $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ микроволновая фотопроводимость является как *P*-, так и *T*-симметричной.

DOI: 10.31857/S1234567823170068, EDN: jzvjjhb

Экспериментальные и теоретические исследования в области физики топологических изоляторов являются одним из важных направлений развития современной физики твердого тела [1, 2]. Интерес к указанной области связан с принципиальной возможностью реализации в топологических изоляторах поверхностных электронных состояний с дираковским законом дисперсии и, соответственно, нулевой эффективной массой. Предполагается, что такие электронные состояния являются топологически защищенными, поскольку их формирование определяется инверсией энергетических зон в объеме полупроводника. Кроме того, направление спина электрона жестко привязано к направлению его квазиимпульса, поэтому рассеяние назад оказывается сильно подавленным [3].

Одним из подходов к исследованию поверхностных электронных состояний в топологических изоляторах является их оптоэлектронное зондирование. Во многих случаях фотоэлектрические эффекты, такие как фотогальванический эффект [4–6] и фотоэлектромагнитный эффект [7–9], не чувствительны к объемной проводимости, даже если концентрация свободных носителей заряда велика.

Полупроводниковые твердые растворы

$\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ представляют собой необычный случай реализации топологической фазы. Во-первых, спин-орбитальное взаимодействие уменьшается с увеличением содержания CdTe x в сплаве. Поэтому энергетический спектр электронов инвертирован и соответствует топологическому состоянию при $x < 0.16$, а при $x > 0.16$ спектр является прямым, и формируется тривиальная фаза [10–12]. Следовательно, можно осуществить переход между топологической и тривиальной фазами при изменении состава сплава. Кроме того, современные методы эпитаксиального роста позволяют синтезировать пленки $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ с низкой свободной концентрацией носителей $\sim 10^{14} \text{ см}^{-3}$. Это дает возможность измерять фотопроводимость на фоне этой довольно низкой равновесной концентрации носителей.

Ранее было обнаружено, что в структурах на основе толстых пленок $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$, с инверсным электронным энергетическим спектром, сигнал фотопроводимости, возбуждаемой лазерными терагерцовыми импульсами, оказывается асимметричным по магнитному полю. Данную ситуацию можно рассматривать как нарушение *T*-симметрии. Эффект является совершенно необычным для материалов, в которых отсутствует встроенный магнитный момент. Кроме того, фотопроводимость оказывается несимметрич-

¹⁾ e-mail: khokhlov@mig.phys.msu.ru

ной для двух зеркально расположенных пар потенциальных контактов, что можно трактовать как нарушение P -симметрии. В то же время фотоотклик не изменяется при одновременной инверсии магнитного поля и замене пары потенциальных контактов на зеркально расположенную, демонстрируя PT -инвариантность. Важно подчеркнуть, что вышеуказанные эффекты нарушения симметрии наблюдаются только в неравновесной ситуации. Равновесные характеристики, такие как магнитосопротивление, симметричны по магнитному полю и не отличаются для зеркальных пар потенциальных контактов [13].

В работах [14, 15] было показано, что причина появления PT -симметричной фотопроводимости в образцах с геометрией холловского мостика связана с тем, что, помимо обычного фототока, симметрично по направлению магнитного поля и протекающего по объему пленки, существуют краевые киральные фототоки, свойства которых крайне необычны. Эти фототоки текут вдоль края образца вокруг него. Киральность таких фототоков меняется на противоположную при изменении полярности приложенного напряжения, а также направления приложенного магнитного поля. Краевые фототоки складываются с “объемными” на одной стороне холловского мостика и вычитаются из них на противоположной, приводя к появлению PT -симметричной фотопроводимости. В чистом виде киральные краевые фототоки были ранее зарегистрированы в нелокальной геометрии эксперимента, когда токовые контакты удалены от потенциальных, и эффект растекания равновесного тока практически отсутствует [14].

Следует особо отметить, что наличие эффекта противоречит видимой симметрии эксперимента [13, 14]. Кроме того, в работе [13] было показано, что существование эффекта не может быть связано с какой-либо анизотропией или неоднородностью образца любой природы. Действительно, при перевороте образца на 180 градусов относительно оси, нормальной к его поверхности, эффект не изменяется в лабораторной системе координат, т.е., например, повышенная фотопроводимость при определенном направлении магнитного поля переходит с одного физического края образца на другой. Следовательно, за существование эффекта отвечает какой-то внешний по отношению к образцу фактор, который нарушает симметрию эксперимента. В работе [13] было показано, что таким фактором не являются: возможное существование компонент магнитного поля вдоль или поперек образца, градиент интенсивности излучения, циркулярная либо линейная поляризация

излучения, отклонение угла падения излучения от нормального.

Энергия кванта терагерцового излучения, использованного для возбуждения фотопроводимости в работах [13–16], составляла несколько мэВ, что сопоставимо с характерными энергиями электронного спектра E_x исследованных образцов $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$. Целью настоящей работы являлась попытка обнаружения фотопроводимости в рассматриваемых структурах при фотовозбуждении микроволновым излучением со значительно меньшей энергией кванта ~ 0.2 мэВ, которая заведомо существенно меньше E_x , что исключает эффекты фотогенерации.

Для нашего эксперимента были выбраны характерные образцы с инверсным и прямым спектром, для которых при возбуждении терагерцовым излучением ранее наблюдалась (инверсный спектр) и не наблюдалась (прямой спектр) PT -симметричная фотопроводимость. Образцы были синтезированы методом молекулярно-лучевой эпитаксии на полупроводниковой подложке GaAs с ориентацией $\langle 013 \rangle$. На подложке последовательно выращивались буферные слои ZnTe, CdTe, далее варизонный слой $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$, в котором содержание теллурида кадмия x плавно уменьшалось до значения, соответствующего составу рабочего слоя $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$. Толщина рабочего слоя составляла 4 мкм, он покрывался тонким защитным слоем $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ с высоким содержанием кадмия, соответствующим прямому электронному энергетическому спектру. Составы твердых растворов контролировались в процессе роста с помощью эллипсометрии. Детали синтеза изложены в работах [17–19].

Выбранные для данной работы составы x рабочего слоя составляли 0.126 (инверсный спектр) и 0.175 (прямой спектр). Холловские мостики с характерными размерами $5 \cdot 0.5 \text{ мм}^2$ изготавливались с помощью фотолитографии. Контакты к образцам припаивались индием. Все образцы обладали электронной проводимостью, концентрация свободных электронов при температуре $T = 4.2 \text{ К}$ была ниже 10^{15} см^{-3} , подвижность была близка к $10^6 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$.

Образцы помещались в нижней части низкотемпературной вставки, которая вставлялась в сверхпроводящий соленоид. Магнитное поле до 3 Тл было направлено по нормали к поверхности образца. Источником микроволнового излучения был диод Ганна, который располагался в верхней части вставки, имеющей комнатную температуру. Излучение подавалось на образец через трубку из нержавеющей стали диаметром 8 мм. Частота излучения диода Ганна составляла $\sim 50 \text{ ГГц}$, его выходная мощность не

превышала 1.5 мВт. Все измерения проводились при температуре образца 4.2 К.

При измерениях фотопроводимости использовалась двойная модуляционная методика. На токовые контакты холловского мостика подавалось переменное напряжение с частотой порядка 400 Гц, обеспечивающее протекание тока амплитудой ~ 10 мкА через образец. Сигнал дополнительно модулировался путем подачи на диод Ганна импульсов напряжения, вызывающих его включение и генерацию микроволновых импульсов с частотой 13 Гц и скважностью 2. Два этапа демодуляции измеренного на образце сигнала осуществлялись последовательно с помощью селективных усилителей Stanford Research 830.

На рисунке 1 представлена зависимость фотопроводимости $\Delta\sigma$ образца с $x = 0.126$ с инверсным

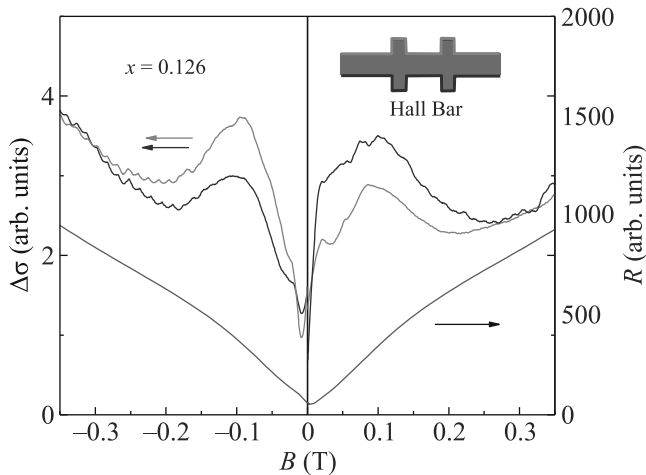


Рис. 1. (Цветной онлайн) Зависимость фотопроводимости образца с составом $x = 0.126$ от магнитного поля для различных пар потенциальных контактов на образце (зеленая и синяя кривые, левая ось); магнитополевая зависимость сопротивления образца в равновесных условиях (серая кривая, правая ось)

электронным энергетическим спектром от величины и направления магнитного поля B для двух пар потенциальных контактов, расположенных на противоположных краях холловского мостика (зеленая и синяя кривые). Фотопроводимость $\Delta\sigma$ в данном случае мы определяем как отношение задающего полного тока через образец к изменению падения напряжения на потенциальных контактах, связанному с подачей импульса излучения. В нулевом магнитном поле фотопроводимость является положительной, и амплитуда сигнала фотопроводимости близка для противоположно расположенных пар потенциальных контактов. При увеличении магнитного поля сигнал фотопроводимости растет, однако этот рост происходит с заметно различной скоростью для про-

тивоположных направлений магнитного поля. Фотопроводимость достигает максимума при $B \approx 0.1$ Тл, затем уменьшается, проходит через минимум в поле около 0.3 Тл, и возрастает при дальнейшем увеличении B .

Следует обратить внимание на две особенности полевой зависимости фотопроводимости. Прежде всего, асимметрия фотопроводимости в магнитном поле $B < 0.3$ Тл для противоположных сторон холловского мостика такова, что при одновременной замене пары потенциальных контактов и направления магнитного поля на противоположные амплитуда сигнала практически не изменяется. Кроме того, указанная асимметрия для противоположных пар потенциальных контактов исчезает в полях выше 0.4 Тл. Отметим также, что равновесное магнитосопротивление в отсутствие микроволнового излучения (серая кривая, правая ось) является симметричной функцией магнитного поля.

На рисунке 2 представлена полевая зависимость фотопроводимости для противоположных пар по-

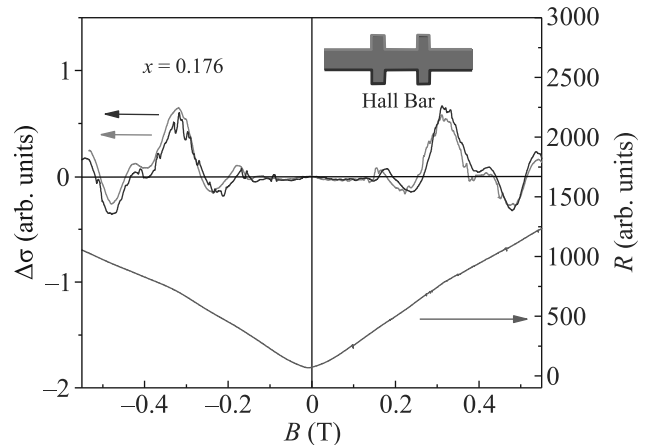


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость фотопроводимости образца с составом $x = 0.176$ от магнитного поля для различных пар потенциальных контактов на образце (зеленая и синяя кривые, левая ось); магнитополевая зависимость сопротивления образца в равновесных условиях (серая кривая, правая ось)

тентциальных контактов (зеленая и синяя кривые) для образца с содержанием теллурида кадмия в активном слое $x = 0.176$, соответствующим прямому электронному энергетическому спектру. Фотопроводимость в нулевом поле практически отсутствует: ее амплитуда, как минимум, на порядок величины меньше, чем для образца с инверсным спектром. В условиях приложения магнитного поля фотопроводимость становится знакопеременной. На магнитополевой зависимости фотопроводимости наблюдается несколько пиков, среди которых особо выделяет-

ся пик положительной фотопроводимости, наблюдающийся в поле $B \approx 0.3$ Тл. В отличие от образца с инверсным спектром, однако, зависимость $\Delta\sigma(B)$ является симметричной в магнитном поле и совпадает для противоположных пар потенциальных контактов. Полевая зависимость магнитосопротивления (серая кривая, правая ось) также симметрична.

Таким образом, можно констатировать, что эффект PT -симметричной фотопроводимости в образцах с инверсным электронным энергетическим спектром сохраняется и при фотовозбуждении микроволновым излучением, энергия кванта которого существенно меньше, чем E_x . Это означает, что роль излучения сводится к разогреву свободных носителей заряда, а не связана с фотогенерацией.

Ранее в работах [13–16] было выдвинуто предположение о том, что положительная фотопроводимость, генерируемая импульсами терагерцового излучения в образцах $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$, соответствующих инверсному спектру, обусловлена диффузией горячих электронов в область гетероперехода между пленкой, обладающей инверсным спектром, и буфером, электронный энергетический спектр которого прямой. Согласно теории, в гетеропереходе располагается двумерный слой дираковских топологических состояний. При переходе в этот слой горячие носители заряда приобретают меньшую эффективную массу и, следовательно, повышенную подвижность, что приводит к появлению положительной фотопроводимости. В то же время следует признать, что данное объяснение никак не проясняет природу PT -симметричной фотопроводимости, которая наблюдается при возбуждении как терагерцовыми, так и микроволновыми импульсами. Тем не менее, представляется важным, что уменьшение энергии кванта излучения до ~ 0.2 мэВ не влияет на факт существования эффекта PT -симметричной фотопроводимости в топологической фазе $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$.

Следует также подчеркнуть, что в тривиальной фазе $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ фотопроводимость в нулевом поле практически отсутствует. В данном случае и буфер, и пленка соответствуют прямому спектру, следовательно, слой с дираковским законом дисперсии электронов на их границе раздела не формируется, а горячие электроны не могут приобрести повышенную подвижность. Поскольку при приложении магнитного поля, а также для противоположно расположенных пар потенциальных контактов фотопроводимость не отличается, то становится ясно, что сам по себе эффект PT -симметричной фотопроводимости является специфичным только для инверсного спектра. Определение природы осцилляций фото-

проводимости в магнитном поле, а также механизма возникновения пика положительной фотопроводимости в поле 0.2 Тл требуют дополнительных исследований.

В заключение, в работе обнаружена PT -симметричная фотопроводимость, стимулированная микроволновым излучением, в пленках $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$, соответствующих инверсному энергетическому спектру. Эффект, по всей вероятности, связан со свойствами двумерного слоя, формирующегося между буфером, обладающим прямым спектром, и пленкой с инверсным электронным энергетическим спектром. Для пленок с составом, соответствующим прямому спектру, фотопроводимость является симметричной как по направлению магнитного поля, так и для противоположно расположенных пар потенциальных контактов.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда # 19-12-00034.

1. M. Z. Hasan and C. L. Kane, Rev. Mod. Phys. **82**, 3045 (2010).
2. Y. Ando, J. Phys. Soc. Jpn. **82**, 102001 (2013).
3. O. Breunig and Y. Ando, Nat. Rev. Phys. **4**, 184 (2022).
4. H. Plank and S. D. Ganichev, Solid State Electronics **147**, 44 (2018).
5. K.-M. Dantscher, D. A. Kozlov, P. Olbrich, C. Zoth, P. Faltermeier, M. Lindner, G. V. Budkin, S. A. Tarasenko, V. V. Bel'kov, Z. D. Kvon, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretzky, D. Weiss, B. Jenichen, and S. D. Ganichev, Phys. Rev. B **92**, 165314 (2015).
6. K.-M. Dantscher, D. A. Kozlov, M. T. Scherr, S. Gebert, J. Bärenfänger, M. V. Durnev, S. A. Tarasenko, V. V. Bel'kov, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretzky, Z. D. Kvon, J. Ziegler, D. Weiss, and S. D. Ganichev, Phys. Rev. B **95**, 201103 (2017).
7. S. G. Egorova, V. I. Chernichkin, L. I. Ryabova, E. P. Skipetrov, L. V. Yashina, S. N. Danilov, S. D. Ganichev, and D. R. Khokhlov, Sci. Rep. **5**, 11540 (2015).
8. A. V. Galeeva, S. G. Egorova, V. I. Chernichkin, M. E. Tamm, L. V. Yashina, V. V. Rumyantsev, S. V. Morozov, H. Plank, S. N. Danilov, L. I. Ryabova, and D. R. Khokhlov, Semicond. Sci. Technol. **31**, 095010 (2016).
9. A. V. Galeeva, I. V. Krylov, K. A. Drozdov, A. F. Knjazev, A. V. Kochura, A. P. Kuzmenko, V. S. Zakhvalinskii, S. N. Danilov, L. I. Ryabova, and D. R. Khokhlov, Beilstein J. Nanotechnol. **8**, 167 (2017).
10. A. Rogalski, Rep. Prog. Phys. **68**, 2267 (2005).
11. M. Weiler, *Semiconductors and semimetals*, ed. by R. Willardson and A. Beer, Academic press, N.Y. (1981), v. 16, p. 119.

12. M. Orlita, D.M. Basko, M.S. Zholudev, F. Teppe, W. Knap, V.I. Gavrilenko, N.N. Mikhailov, S.A. Dvoretzskii, P. Neugebauer, C. Faugeras, A.-L. Barra, G. Martinez, and M. Potemski, *Nat. Phys.* **10**, 233 (2014).
13. A.V. Galeeva, A.S. Kazakov, A.I. Artamkin, L.I. Ryabova, S.A. Dvoretzky, N.N. Mikhailov, M.I. Bannikov, S.N. Danilov, and D.R. Khokhlov, *Sci. Rep.* **10**, 2377 (2020).
14. A.V. Galeeva, A.I. Artamkin, A.S. Kazakov, A.V. Ikonnikov, L.I. Ryabova, S.A. Dvoretzky, N.N. Mikhailov, M.I. Bannikov, S.N. Danilov, and D.R. Khokhlov, *Sci. Rep.* **11**, 1587 (2021).
15. A.S. Kazakov, A.V. Galeeva, A.I. Artamkin, A.V. Ikonnikov, L.I. Ryabova, S.A. Dvoretzky, N.N. Mikhailov, M.I. Bannikov, S.N. Danilov, and D.R. Khokhlov, *Sci. Rep.* **11**, 11638 (2021).
16. A.V. Galeeva, A.I. Artamkin, A.S. Kazakov, S.N. Danilov, S.A. Dvoretzskiy, N.N. Mikhailov, L.I. Ryabova, and D.R. Khokhlov, *Beilstein J. Nanotechnol.* **9**, 1035 (2018).
17. K.K. Svitashv, S.A. Dvoretzskiy, Y.G. Sidorov, V.A. Shvets, A.S. Mardezhov, I.E. Nis, V.S. Varavin, V. Liberman, and V.G. Remesnik, *Crystal Research and Technology* **29**(7), 931 (1994).
18. V.S. Varavin, S.A. Dvoretzskiy, D.G. Ikusov, N.N. Mikhailov, V.G. Remesnik, G.Yu. Sidorov, Yu.G. Sidorov, P.N. Sizikov, and I.N. Uzhakov, *Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing* **49**, 4 (2013).
19. S.A. Dvoretzky, D.G. Ikusov, Z.D. Kvon, N.N. Mikhailov, V.G. Remesnik, R.N. Smirnov, Yu.G. Sidorov, and V.A. Shvets, *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics* **10**, 47 (2007).

Экранирующие свойства чистой воды и ее разбавленных растворов

В. Шикин¹⁾

Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка, Россия

Поступила в редакцию 6 апреля 2023 г.

После переработки 31 июля 2023 г.

Принята к публикации 1 августа 2023 г.

Предлагается описание экранирующих свойств воды и ее разбавленных растворов в рамках статистики, трактующей поведение слабо проводящей жидкости в рамках теории обратимых химических реакций с общим названием “Ионные равновесия”. Ее модификация дает возможность качественно правильно объяснять наблюдаемые детали в поведении экранирующих свойств разбавленных водных растворов, включая предельный случай чистой воды.

DOI: 10.31857/S123456782317007X, EDN: jzwscpe

Чистая вода (*aqua*) – типичный амфотерный электролит с известной равновесной характеристикой $K_{aq}(T)$, называемой “ионное произведение воды” (амфотерность электролита в электрохимии означает принадлежность растворителя к разряду собственных в статистике полупроводников). Согласно данным известной монографии [1]

$$\log_{10} K_{aq} = \frac{A_1}{T} + A_2 + A_3 * T, \quad (1)$$

$$A_1 = 4471.33 \text{ K}, \quad A_2 = -6.0846, \quad A_3 = +0.017053.$$

Определение $\log_{10} K_{aq}$ (1) входит эталонной частью в *pH* – классификацию водных растворов слабых кислот и щелочей. Аккуратность в определении констант A_i из (1) свидетельствует об уверенности авторов [1] в согласованности разных методик, используемых для их оценки.

Экспериментально показано (см., к примеру, [2, 3]), что вода, заполняющая объем плоского конденсатора с блокирующими электродами способна полностью экранировать внешнее электрическое поле в широком интервале управляющей разности потенциалов $0 < V \leq V_{\text{crit}}$ на электродах конденсатора. Здесь V_{crit} – критический порог, отвечающий появлению пробойных явлений на границе металл–электролит. Примеры поведения полного заряда $Q(t)$ аккумуляционного слоя, возникающего на одной из таких поверхностей, собраны на рис. 1 (см. [2, 3]). Цикл измерений состоит из двух частей. В момент времени $t = 0$ на управляющие электроды “1”, “2” плоского конденсатора, заполненного электролитом (водой), подается фиксированная разность

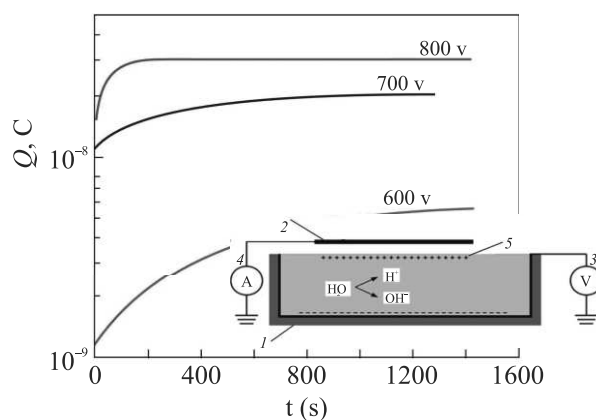


Рис. 1. (Цветной онлайн) Поведение $Q(t)$ в плоской ячейке с водой. Управляющий электрод “2” разделен с электролитом в ванне тонкой диэлектрической прослойкой (ячейка с “запертыми электродами”). Разность потенциалов на электродах “1”, “2” пробегает значения: 600, 700, 800 В. На вставке: 1 – металлическая кювета с водой; 2 – верхний металлический электрод, образующий вместе с металлом “1” плоский конденсатор; 3 – вольтметр, фиксирующий наличие разности потенциалов V между пластинами конденсатора; 4 – прибор (кулонометр), фиксирующий через данные относительно $Q(t)$ электростатические изменения аккумуляционного происхождения в объеме конденсатора; 5 – схематическое положение аккумуляционного слоя вдоль границы металл–электролит

потенциалов V (прибор “3”). Появление возмущения в объеме конденсатора ведет к разделению зарядов в электролите с образованием аккумуляционного слоя на границе металл “2” – электролит (электрод “1” находится в омическом контакте с ванной). Электростатическая перестройка в объеме конденсатора сопровождается притоком зарядов $Q(t)$ извне, про-

¹⁾e-mail: shikin@issp.ac.ru

порциональным степени экранирования возмущения V аккумуляционными полями, что и фиксируется прибором A за номером “4”. Выход кривых $Q(t)$ на плато, независимые от времени, отвечает полной экранировке внешнего поля собственными зарядами электролита.

В критических условиях $|V| \geq V_{\text{crit}}$ этот заряд перестает стремиться к насыщению, начиная квазилинейно расти со временем (пробойные явления, см. [3]). Сами значения V_{crit} определяются равновесными характеристиками электролита, включая статические значения его диэлектрической постоянной. Для условий рис. 1 $V_{\text{crit}} \leq 900$ В.

Описание экранирующих свойств воды как собственного электролита предлагается в данной заметке. При этом информации (1) недостаточно для количественных заключений о масштабах явления. Нужна мотивированная статистика, определяющая поведение $aqua$ -ионов во внешнем электрическом поле.

А. Для начала естественно обсудить имеющиеся расчеты экранирующих свойств симметричного (1 : 1) электролита, ближайшего по кулоновским свойствам чистой воде. В рамках формализма имени Льюиса, Рэндла, Дебая, Хюккеля [4, 5] (детали см. к примеру, в руководствах [1, 6–10]) речь идет о совместном решении уравнения Пуассона с определением электрохимического потенциала $\mu_{\pm}$ в форме

$$\mu_{\pm} = e_{\pm}\varphi + T \ln A_{\pm}, \quad (2)$$

где $A_{\pm}$ – так называемые активности объемных плотностей $N_{\pm}^d$ -ионов, возникающих от распадов ($AB \leftrightarrow A_+ + B_-$) легирующей примеси заданной плотности N_d . Теория Дебая, Хюккеля [5] дает возможность найти явный вид функций $A_{\pm}$, если речь идет об электролите в классических условиях $\langle V_c \rangle \leq T$, и распады доноров AB реализуются на 100 %. Здесь $\langle V_c \rangle$ – средняя кулоновская энергия взаимодействия между ионами, либо во внешнем поле, T – температура.

С учетом (2) для ячейки рис. 1, оформленной в виде плоского конденсатора, заполненного (1 : 1) электролитом, речь идет о системе определений

$$\Delta\varphi = -\frac{4\pi e^2}{\epsilon} \sum_a z_a N_a, \quad \varphi(z=0) = V, \quad \varphi(z \gg \lambda_D) \rightarrow 0, \quad (3)$$

$$N_a(z) = N_{a0} \exp(-z_a e \varphi). \quad (4)$$

Здесь ϵ – диэлектрическая постоянная растворителя (воды), z_a – величина и знак заряда данного типа, N_{a0} – объемная плотность компонент (1 : 1) электролита, отвечающая их значениям вдали от управляющих электродов, там где потенциал $\varphi(z) \rightarrow 0$.

Определение дебаевской длины λ_D , использованное в этом условии, содержится в формулах (5).

Как следствие в линейном по $e\varphi/T \leq 1$ приближении

$$\Delta\varphi = \kappa_D^2 \varphi, \quad \kappa_D^2 = \frac{4\pi e^2}{\epsilon T} \sum_a N_{a0} z_a^2, \quad e \sum_a z_a N_{a0} = 0, \quad (5)$$

где κ_D – обратная дебаевская длина λ_D . В определениях (5) использованы соотношения (3), (4), неравенство $e\varphi/T \leq 1$ и требование общей нейтральности газа $e \sum_a z_a N_{a0} = 0$.

Согласно (5), в формировании длины λ_D участвуют не только константы N_{a0} , но и требования (2), (4) (управление свойствами фракций $N_a(z)$ в рамках статистики Больцмана). Плотности протонов N_+ и гидроксидов OH_- , возникающие в растворе за счет обратимой реакции $H_2O \leftrightarrow (H_+ + OH_-)$, такой статистике не подчиняются. В самом деле, закон (1) в терминах N_+ и N_- дает представление о свойствах произведения фракций протонов N_+ и гидроксидов OH_- : $K_{aq}(T) \propto (N_+ \times N_-)$. Другими словами, в любом водном растворе их произведение есть величина постоянная, независимо от степени легирования раствора “слабыми” примесями (слабыми кислотами, либо щелочами) объемной плотности N_d . В то же время, каждая из составляющих заряженного раствора испытывает влияние N_d легирования (см. ниже формулы (6), (7)): $N_+ \rightarrow N_+(T, N_d)$ и $N_- \rightarrow N_-(T, N_d)$. Как следствие, химическая часть $\zeta_{\pm}$ электрохимического потенциала протонов H_+ и гидроксидов OH_- не есть простая функция $\zeta_{\pm} \propto \ln N_{\pm}$, как это полагается в (2), (4). Кроме того, общим правилом для легирующей фракции раствора является сохранение полного количества N примесных частиц

$$N = \int N_d(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \text{const.}$$

Составляющие N_+ и гидроксидов OH_- такими свойствами не обладают.

Резюмируя, механизм (2)–(5) имеет лишь качественное отношение к интересующему нас определению длин экранирования $\lambda_0^{\pm}$ в чистой воде. Участие собственных ионов в экранировке внешних полей согласованно трактуется формулами теории обратимых химических реакций с общим названием “Ионные равновесия”. Эта статистика, фигурирующая во многих руководствах по тематике, начиная с Гиббса, наиболее полно представлена в книге Батлера [9]. Ее модификация, намеченная в [3, 11] и позволяющая ввести в обиход понятие энергии Ферми в запрещенной зоне воды, использует глубокую аналогию про-

исходящего в разбавленных электролитах со статистикой легированных полупроводников [12].

В. В слабо проводящих средах выполняется ряд универсальных термодинамических соотношений, имеющих место в разбавленных заряженных растворах и кристаллических полупроводниках одновременно. Существование эмпирической базы для сопряжения оказывается достаточным в построении феноменологической статистики разбавленных заряженных растворов (энергостатистики). Речь идет о так называемых константах диссоциации в теории обратимых химических реакций для растворов разного состава [1, 6, 7, 9, 14, 15]. В частности, нас интересует ионное произведение воды с константой диссоциации $K_{aq}(T)$ (1) и закон Освальда с константой диссоциации $K_d(T)$. Обе константы: $K_{aq}(T)$ и $K_d(T)$ – доступны измерениям с хорошей точностью (см. [1, 6, 7, 9]) и в обсуждаемой феноменологии считаются известными. На этой почве можно предложить систему определений в описании свойств разбавленных электролитов, коррелирующих с основными формулами электрон-дырочной статистики для кристаллических полупроводников. Использование отмеченного взаимосоответствия с участием констант $K_{aq}(T)$ и $K_d(T)$ и составляет основу процедуры сопряжения (детали см. [3, 11] и Приложение).

Согласно [3, 11], разбавленный раствор уксусной кислоты (пример, удобный для иллюстраций общих закономерностей) обладает свойствами слабо легированного полупроводника n -типа. Схема энергетических уровней представлена на рис. 2. Все энергии отсчитываются от потолка валентной зоны. Протоны H_+ условно заполняют нижнюю часть зоны проводимости, гидроксилы именуемые антипротонами OH_- , заполняют верхнюю часть валентной зоны. Уксусная кислота, легирующая воду избыточными протонами, играет роль донорной добавки. Числа на схеме берутся из экспериментальных данных. Для воды ширина запрещенной зоны $E_g \simeq 10250$ К. Положение донорного уровня обозначено на рис. 2 через E_2 . “Разность” $E_d = (E_g - E_2) \simeq 2690$ К. Акцепторы на уровне E_1 в задаче о свойствах разбавленного раствора слабой кислоты отсутствуют.

Поведение уровня Ферми E_F в запрещенной зоне E_g собственного электролита (воды) для разбавленного водного раствора следует из решения трансцендентного уравнения (6) относительно E_F , возникающего из требования локальной нейтральности в объеме слабо легированного электролита

$$N_+ = N_- + N_d^-, \quad (6)$$

$$N_+ \simeq N_+^0 \exp[(E_F - E_g)/T], \quad (7)$$

$$N_- \simeq N_-^0 \exp[(-E_F)/T],$$

$$N_d^- = \frac{N_d}{1 + \exp(E_F - E_2)/T}. \quad (8)$$

Здесь, как и выше, N_+ – объемная плотность протонов H_+ , N_- – объемная плотность анти-протонов (гидроксила) OH_- , N_d – объемная плотность легирующей примеси), N_+^0 и N_-^0 – феноменологические константы, требующие определения. В этой процедуре принимают участие упомянутые выше условия сопряжения.

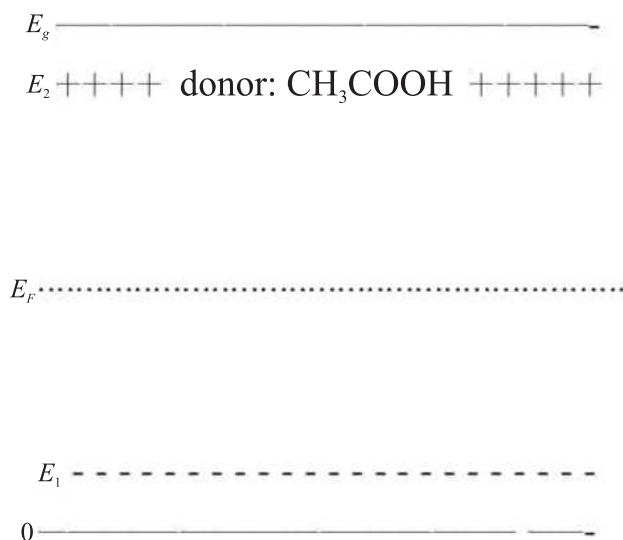


Рис. 2. Энергетический спектр воды. E_1 , E_F , E_2 , E_g – уровень акцептора, положение уровня Ферми, уровень донора, ширина запрещенной зоны – соответственно. Все энергии отсчитаны от потолка валентной зоны

Пользуясь намеченным в [3, 11] алгоритмом и данными [1, 6] относительно констант $K_{aq}(T)$, $K_d(T)$, находим численные значения плотностей N_+^0 и N_-^0 для пары вода–уксус. Соответствующая программа действий детализирована в Приложении и ведет к результатам, собранным на рис. 3. В статистике [3, 11] так же, как и в [12, 13], эти данные должны быть универсальными, возникающими из обработки информации [1, 6] для любых пар: вода–слабая кислота.

С. Располагая формулами (6)–(8), возвращаемся к определению длин экранирования $\lambda_0^\pm$ для чистой воды. С этой целью надо заменить больцмановское условие стационарности (3) общими требованиями на потоки $j_\pm^{aq}$, значения которых в равновесии должны быть нулевыми на всей оси OZ

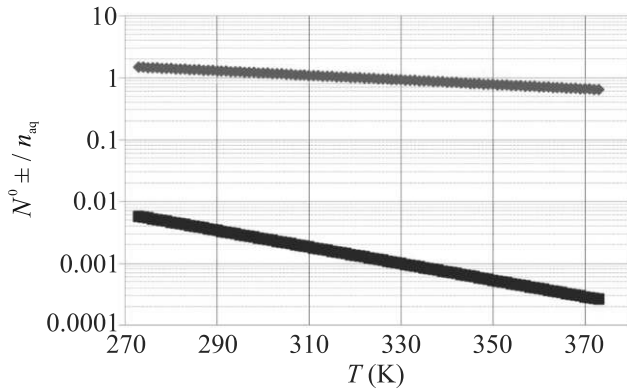


Рис. 3. (Цветной онлайн) Информация относительно численных значений плотностей $N_+^0(T)$ (красная линия) и $N_-^0(T)$ (синяя линия), отнесенные к плотности воды n_{aq} для пары вода–уксус

$$j_{\pm}^{aq}(z) = 0, \quad \text{или,} \quad e_{\pm} N_{\pm}^{aq}(z) \varphi(z) + \frac{\partial E_F}{\partial N_{\pm}^{aq}} \frac{\partial N_{\pm}^{aq}}{\partial z} = 0, \quad (9)$$

где производные $\partial E_F / \partial N_{\pm}^{aq}$ вычисляются с помощью формул (7). Кроме того, надо иметь в виду, что при заданном внешнем поле потоки $j_{\pm}^{aq}$ направлены в разные стороны.

Как следствие, линеаризованное по φ уравнение Пуассона сводится к виду (как и в формулах (5)),

$$\frac{d^2 \varphi}{dz^2} \simeq +\varphi / \lambda_{aq}^2, \quad \lambda_{aq}^{-2} = \frac{4\pi e^2}{\epsilon_{aq} T} (N_+ \times N_-)^{1/2},$$

$$N_+ \times N_- = N_+^0 \times N_-^0 \exp(-E_g/T). \quad (10)$$

Здесь учтено, что $\lambda_0^+ = \lambda_0^- = \lambda_0^{aq}$; численные значения N_+^0 и N_-^0 представлены на рис. 3.

Резюмируя, длина $\lambda_0^{\pm}$ из (10) не зависит от N_d . Длина λ_D из (5), напротив, чувствительна к плотности доноров: $\lambda_D \propto N_d^{-1/2}$. Эта разница вполне осязаема и заслуживает специального внимания с учетом информации, собранной ниже при обсуждении формул (17)–(23). Здесь же отметим, что в газовых условиях

$$N_d \lambda_{aq}^3 \ll 1, \quad (11)$$

для легированных полупроводящих сред (кристаллических и жидких) характерно специальное “гранулированное” состояние. Каждый из доноров (акцепторов) в этой ситуации ионизирован практически на 100 % (свойства закона Освальда). Но перемещаясь с локальных уровней схемы рис. 2 в зону проводимости, донорные свободные заряды остаются локализованными в экранирующих шубах каждого из заряженных центров N_d , не пополняя фракции подвижных ионов [16].

Формально отдельная гранула имеет “дебаевскую” структуру (подробнее см. формулы (19), (20))

$$\varphi_a(r) = e \frac{\exp(-\kappa_{aq} r)}{r}, \quad (12)$$

с величиной $Z = 1$ и $\lambda_{aq} \equiv \kappa_{aq}^{-1}$ из (10) взамен κ_D (5), (19).

Другие примеры, иллюстрирующие свойства “гранулированного” состояния легированных полупроводящих сред, собраны ниже.

Д. Показателен эффект Вагнера, Онсагера, Самараса [17, 18] о наблюдаемом (см. к примеру [14]) влиянии конечной плотности легирующей примеси в электролите на поверхностное натяжение границы жидкость–пар. Основные формулы этой теории суть

$$F_{\text{вос}}^{\odot}(z) \simeq F_{\epsilon}(z) \exp(-2z/\lambda_{aq}),$$

$$F_{\epsilon}(z) = -\frac{Q^2(\epsilon_1 - \epsilon_2)}{4\epsilon_1(\epsilon_1 + \epsilon_2)z^2}. \quad (13)$$

Величина ϵ_1 отвечает среде, в которой находится пробный заряд, знак $(\epsilon_1 - \epsilon_2) > 0$ отвечает отталкиванию ($F_{\epsilon}(z) > 0$), λ_0 из (10). Сами авторы [17, 18] использовали в показателе экспоненты длину λ_D , нарушая стройность рассуждений при $N_d \rightarrow 0$. Согласно (13) каждый из заряженных доноров полностью экранирован в объеме электролита (вдали от границы раздела), утверждение, прекрасно коррелирующее с информацией (12).

Задача о легировании удачно сопрягается со статистикой *DLVO*-коллоидных растворов [19, 20]. Разница в структурах кластеров сводится к замене борновского радиуса a_b донора на затравочный радиус $R_0 \geq a_b$ заряженного ядра *DLVO*-коллоида. При этом газовое требование (11) преобразуется в неравенство (14)

$$N_{\odot}(R_0 + \lambda_0)^3 < 1, \quad N_{\odot} \equiv N_d. \quad (14)$$

Здесь $N_{\odot}$ – равновесная плотность *DLVO*-коллоидов в объеме полиэлектролита.

Формула (14) качественно универсальна, допускающая варьирование радиуса ядра от атомных размеров кластера, когда затравка R_0 имеет масштаб атомного, до типичных размеров *DLVO*-коллоидов [19, 20] с размерами $R_0 \geq \lambda_0$. Ясно, что, как и в (11), требование (14) может содержать экранирующей составляющей лишь длину $\lambda_0 \equiv \lambda_0^{aq}$.

Зададимся вопросом об осмотическом давлении $\Pi(N_{\odot})$ в газовой среде с параметрами (14). Практика работы с *DLVO* коллоидными средами позволяет трактовать ее свойства в терминах, присущих

слабо неидеальным газам. 3Д уравнение состояния, определяющее зависимость осмотического давления $\Pi_{\text{bulk}}(\phi)$ в газе коллоидных сфер от безразмерной концентрации ϕ , имеет вид [21–23]

$$\frac{\Pi_{\text{bulk}}(\phi)V_{\odot}}{T\phi} = \frac{1 + \phi_* + \phi_*^2 - \phi_*^3}{(1 - \phi_*)^3} \quad (15)$$

$$\phi = N_{\odot}V_{\odot}, \quad \phi_* = \phi(1 + \lambda_0/R_0)^3, \quad V_{\odot} = 4\pi R_0^3/3. \quad (15a)$$

Здесь $\phi = N_{\odot}V_{\odot}$ – безразмерная, однородная плотность коллоидов, $V_{\odot}$ – объем отдельного коллоида, ϕ_* – эффективная *volume fraction* с учетом экранирующей шубы, покрывающей ядро DLVO-коллоида (в определении уровня легирования $N_{\odot} \equiv N_d$, определение ϕ коррелирует с (11), (14)).

Очевидно, уравнение состояния (15) слабо неидеально в меру $\phi \leq 1$, непрерывно “скатываясь” к идеалу в пределе $\phi \ll 1$. Этот результат подчеркивает вторичность взаимодействия между экранированными донорами (коллоидами) в формировании конечных продуктов диссоциации. В нашем случае формула (15) говорит о том, что с ростом плотности в область $\phi = N_{\odot}V_{\odot} \leq 1$ осмотическое давление $\Pi(N_{\odot})$ растет. Эксперимент [24, 25] по рассеянию рентгеновских лучей на разбавленных коллоидных растворах подтверждает предсказания (15).

В условиях (14) DLVO-коллоиды, оставаясь интегрально нейтральными, линейно (пока $\phi \ll 1$) меняют объемную проводимость $\sigma(\phi)$ коллоидного раствора

$$\frac{\sigma(\phi)}{\sigma_0} = 1 + \frac{3(\sigma_{\odot}/\sigma_0 - 1)\phi}{\sigma_{\odot}/\sigma_0 + 2 - (\sigma_{\odot}/\sigma_0 - 1)\phi}, \quad (16)$$

где $\sigma_{\odot}$ – эффективная проводимость включения, σ_0 – проводимость жидкой матрицы, ϕ – безразмерная плотность (*volum fraction*) коллоидной суспензии,

Предсказания (16), восходящие к результатам Максвелла [26], убедительно проявляют себя в транспортных экспериментах [27–30].

Е. Нарастивая плотность $N_{\odot}$, переходим в область

$$N_{\odot}(R_0 + \lambda_0)^3 \geq 1, \quad (17)$$

альтернативную (14). При этом газовая трактовка (15) свойств заряженного раствора теряет точность. Дебаевские шубы соседних ионов начинают перекрываться между собой, и надо работать в рамках статистики Дебая, Хюккеля [5, 14].

Корреляционная часть E_{cor} энергии кулоновски взаимодействующего газа имеет вид

$$E_{\text{cor}} = \frac{V}{2} \sum_a e z_a n_{ao} \varphi_a. \quad (18)$$

Здесь z_a – кратность заряда, n_{ao} – равновесная плотность данного сорта зарядов (не обязательно ионов), φ_a – потенциал поля, действующего на заряд a -го сорта со стороны остальных зарядов, V – объем системы.

Для расчета потенциалов φ_a используется схема рассуждений [5, 14], дающая возможность свести локальное значение потенциала $\varphi_a(r)$ с центром на заряде $e z_a$ к выражению, следующему из уравнения (5)

$$\begin{aligned} \varphi_a(r) &= e z_a \frac{\exp(-\kappa_D r)}{r}, \\ \kappa_D^2 &= \frac{4\pi e^2}{T} \sum_a n_{ao} z_a^2, \\ \sum_a e z_a n_{ao} &= 0, \end{aligned} \quad (19)$$

где, как и в (5), κ_D – обратная дебаевская длина.

Разлагая потенциал $\varphi_a(r)$ (19) в ряд при малых $\kappa_D r$, найдем

$$\varphi_a(r) \simeq \frac{e z_a}{r} - e z_a \kappa_D + \dots \quad \varphi_a = -e z_a \kappa_D \quad (20)$$

Опущенные члены обращаются в нуль при $r \rightarrow 0$. Первое слагаемое есть потенциал собственного иона. Второй же член имеет смысл потенциала, создаваемого окружающими ионами в точке нахождения данного иона. Другими словами, определение φ_a из (18) имеет смысл: $\varphi_a = -e z_a \kappa$.

Как следствие, энергия E_{cor} принимает вид

$$E_{\text{cor}} = \frac{V}{2} \kappa_D r e^2 \sum_a z_a^2 n_{ao} \quad (21)$$

или с использованием $N_a = n_{ao}V$, где V – объем, занимаемый ансамблем частиц N_a ,

$$E_{\text{cor}} = -e^2 \sqrt{\frac{\pi}{TV}} \left(\sum_a n_a z_a^2 \right)^{3/2}. \quad (22)$$

Пересчет результата (22) на давление P дает (см. [14])

$$P = \frac{NT}{V} - \frac{e^3}{3V^{3/2}} \sqrt{\frac{\pi}{T}} \left(\sum_a n_a z_a^2 \right)^{3/2}. \quad (23)$$

Корреляционная поправка кулоновского происхождения к идеальному давлению оказывается отрицательной.

Результаты (22), (23) подтверждены в свое время более продвинутыми исследованиями [31], что

позволяет говорить о реальном “водоразделе” между свойствами очень разбавленных (“гранулированных”) и разбавленных электролитов. В первом случае речь идет о персональной экранировке собственными ионами воды каждого из легирующих доноров (либо ядер *DLVO*-образований) в ситуации, обеспечивающей выполнение неравенства (14). В этих условиях разбавленный раствор статистически демонстрирует свойства слабо неидеального газа имени Ван-дер-Ваальса с уравнением состояния в форме (15) и длиной экранировки λ_0^{aq} (10). Дебаевская длина экранирования $\lambda_D \propto n_d^{-1/2}$ (5), (19) в этой области превосходит значения λ_0^{aq} и не участвует (как и вся статистика Дебая, Хюккеля [5]) в определении свойств “гранулированного” газа. Разложения вида (20) имеют смысл в условиях $R_0 \leq \lambda_D$. Это говорит о том, что статистика Дебая, Хюккеля [5] вообще не пригодна для *DLVO*-коллоидов с $R_0 \geq \lambda_D$.

Альтернатива возникает в условиях

$$\lambda_D \mapsto \lambda_0^{aq}, \quad (24)$$

когда, уменьшаясь со стороны малых n_d , длина λ_D приближается к значению λ_0^{aq} , и экранирующие оболочки гранулированных коллоидов начинают перекрываться между собой. Разложение (20) имеет смысл в условиях $R_0 \leq \lambda_D$. Для “боровских” доноров, дебаевский газ остается идеальным, если корреляционная поправка (21), (22) мала на фоне идеальной составляющей. Это требование обычно трактуется с использованием параметра Γ (см. определения (3), использованные выше)

$$\Gamma \simeq \tilde{V}_c/T \leq 1, \quad \tilde{V}_c \simeq e^2/\epsilon r_s \quad (25)$$

где r_s среднее расстояние между кулоновскими центрами. В нашем случае неравенство (25) сводится к форме

$$n_d \lambda_D^3 \leq 1, \quad (26)$$

где λ_D^3 – дебаевская длина из (5), (19). С учетом $\lambda_D \propto n_d^{-1/2}$ неравенство (26) служит ограничением снизу на плотность n_d . В области $n_d \rightarrow 0$ экранировка мелких доноров реализуется (согласно (12)) с помощью длины λ_0^{aq} . А неравенство (26) преобразуется в требование (11).

Дебаевский газ Ван-дер-Ваальса с уравнением состояния в форме (23) альтернативен своими свойствами газу (15), (15а), подчеркивая разницу между очень разбавленными в условиях (14) и просто разбавленными, если имеет место ситуация (17), слабыми заряженными растворами.

Продолжая тему корреляций, обратимся к работе [32] с общим названием “Экранировка электрического поля в воде” и гипотезой о возможном усложнении

процесса диссоциации молекул H_2O в чистой воде. Согласно этой работе, вода в жидком состоянии сохраняет структурные корреляции, широко представленные во льду. Как следствие, в распадах молекул воды присутствуют не две, а четыре заряженные компоненты: гидроксоний H_3O^+ с зарядом $+0.62e$, гидроксил OH^- с зарядом $-0.62e$ и, дополнительно, корреляционные осколки со своей энергией активации. Среди них: дефекты D с зарядом $+0.38e$ и дефекты L с зарядом $-0.38e$. Усложнение процесса диссоциации заметно влияет (по мнению авторов [32]) на эффективную длину экранирования и корректирует в нужную сторону значение статической диэлектрической постоянной ϵ_{aq} чистой воды. Как известно, микрорасчет ϵ_{aq} дает для воды при комнатном значении $\epsilon_{aq} \simeq 50$, вместо наблюдаемой $\epsilon_{aq} \simeq 80$ (см., к примеру, [33]).

Но если D, L -фрагментация собственных ионов отражается на свойствах ϵ_{aq} , она же должна влиять и на температурную зависимость коррелятора $K_{aq}(T)$. Однако, в существующей форме закономерность (1) однозначно говорит об отсутствии D, L -усложнений в распадах $\text{H}_2\text{O} \leftrightarrow (\text{H}^+ + \text{OH}^-)$. Обработка данных (1) с использованием языка (6)–(8) обнаруживает лишь один канал распада молекул H_2O на заряженные фрагменты с энергией активации $E_g \simeq 10250 \text{ K}$, играющую роль ширины запрещенной зоны собственного электролита (детали см. Приложение с экспериментальной поддержкой параметрами для уксуса и конечными результатами, собранными на рис. 2, 3, 1А). Никаких уточнений в структуре коррелятора $K_{aq}(T)$ (1) литература по тематике за последние полвека не содержит (точнее, автору они неизвестны).

Г. Совокупность данных рис. 1 интересна не только асимптотиками $Q(t \rightarrow \infty)$ для разных значений V управляющего напряжения на электродах конденсатора. Электрохимическая литература полна сообщениями о релаксационных явлениях вида $Q(t)$, сопровождающих кинетику образования аккумуляционных слоев в схемах вида рис. 1 с участием электролитических конденсаторов. В подробной обзорной работе [34] с ретроспективой вплоть до начала 1900-х обсуждается современное положение дел с релаксационными явлениями в ячейках с “запертыми концами” вида рис. 1 (в основном, численными средствами). Из вопросов по существу эта деятельность берется ответить на вопрос, почему характерные релаксационные времена τ_{relax} для $Q(t)$ -кинетики водных электролитов заметно длиннее стандартного времени релаксации $\tau_{\text{Maxw}} \sim \sigma_{aq}^{-1}$. Напомним, что для воды при комнатном $\sigma_{aq}^{-1} \leq 10^{-3} \text{ с}$. Здесь же по-

лезно указать масштабы характерного, вращательного времени Дебая $\tau_{deb} \leq 10^{-8}$ с в физике полярных, жидких диэлектриков. В то же время типичные времена для $Q(t)$ на рис. 1 имеют масштаб $\tau_{relax} \sim (10^2 - 10^3)$ с. Часть задач из [34], исследованных, в основном, численными средствами, решена аналитически в работах [35–38].

Относительно недавно наметился повышенный интерес к поведению $DLVO$ -коллоидов вблизи границы металл-электролит (см., к примеру, [39]). Привлечение к трактовке возникающих здесь результатов идей Вагнера, Онсагера, Самараса [17, 18] реализовано в работе [40].

Резюме. Предложено согласованное определение экранирующей длины λ_{aq} (10) для воды и ее разбавленных растворов с использованием статистики, трактующей поведение слабо проводящей жидкости как собственного полупроводника. В рамках формализма введено понятие об очень разбавленных (гранулированных) заряженных растворах без перекрытия в условиях (14) экранирующих “шуб” соседних заряженных доноров. Показано, что с нарушением требования (14) осмотическое давление $\Pi_{bulk}(\phi)$ меняет свои свойства с закономерности (15) на альтернативу (23), демонстрируя смену знака производной $\partial \Pi_{bulk}(\phi)/\partial \phi$. Такие детали в поведении осмотического давления доступны (и заслуживают) экспериментальной проверки. В последнее время резко возрос интерес к задачам с участием $DLVO$ -коллоидов вблизи границы металл-электролит (см., к примеру, публикацию [39]). Использование в этой области результатов Вагнера, Онсагера, Самараса [17, 18] составляет содержание работы [40].

Автор благодарен Б. Тимофееву за обсуждение результатов работы и участие в расчетах вместе с оформлением графиков.

Приложение. Формулы сопряжения для раствора уксуса в воде

Поведение уровня Ферми E_F в запрещенной зоне E_g собственного полупроводника (воды) следует из решения трансцендентного уравнения (6) основного текста относительно E_F с привлечением требования локальной нейтральности в объеме легированного электролита (его дубль (A.1) приведен в Приложении для удобства)

$$N_+ = N_- + N_d^- \quad (A.1)$$

Здесь плотности N_+ , N_- определены формулами (7) основного текста, N_d^- – из (8), N_d – объемная плотность легирующей примеси, N_+^0 и N_-^0 – феноменологические константы, требующие определения.

К этой процедуре привлекаются упомянутые выше условия сопряжения.

Первое из них связано с произведением $(N_+ * N_-)$ (см. определения (7) основного текста). Это соотношение оказывается независимым от параметра E_F (общее свойство, имеющее место и в электрон-дырочной статистике [13])

$$N_+ \times N_- = N_+^0 N_-^0 \exp(-E_g/T). \quad (A.2)$$

Эта формула роднит ее своей структурой с определением константы $K_{aq}(T)$ в так называемом “ионном произведении воды” (см. [1, 6])

$$K_{aq} = \alpha_{aq}^2 \text{ (моль/л)}^2, \quad (A.3)$$

где α_{aq} – степень диссоциации молекул воды в распаде $H_2O \rightarrow H_+ + OH_-$.

Константа диссоциации K_{aq} тщательно измерена разными средствами (см. [1, 6]). В интересующем нас виде она представлена выражением (1) основного текста и (A.4) (для удобства)

$$\log_{10} K_{aq} = \frac{A_1}{T} + A_2 + A_3 * T, \quad (A.4)$$

$$A_1 = 4471.33 \text{ K}, \quad A_2 = -6.0846, \quad A_3 = +0.017053$$

из содержательной книги [1].

Реализуя намеченную программу, сопрягаем (A.2) и (A.4)

$$K_{aq}(T) \leftrightarrow N_+^* N_-^* \exp(-E_g/T), \quad N_+^* = \gamma N_+^0, \quad (A.5)$$

$$N_-^* = \gamma N_-^0, \quad \gamma = 1000/R,$$

рассчитывая на продвижение в определении констант N_+^0 и N_-^0 . При этом надо помнить о разных системах единиц, бытующих в определениях $K_{aq}(T)$ (A.4) (речь идет о единицах (моль/л)) и $N_+ \times N_-$ (A.2) (в определениях (6), (7) основного текста подразумевается система $CGSE$). Фактор γ в обозначениях N_+^* и N_-^* учитывает это обстоятельство. R – число Авогадро.

Желая согласованно использовать эмпирическую формулу (A.4), обезразмерим связь (A.5), вводя вспомогательную плотность n_*

$$n_* = (\text{один моль})/\text{л}, \quad (A.6)$$

так что

$$\tilde{K}_{aq}(T) = N_+^* N_-^* \exp(-E_g/T)/n_*^2, \quad (A.7)$$

$$\tilde{K}_{aq}(T) = K_{aq}(T)/n_*^2,$$

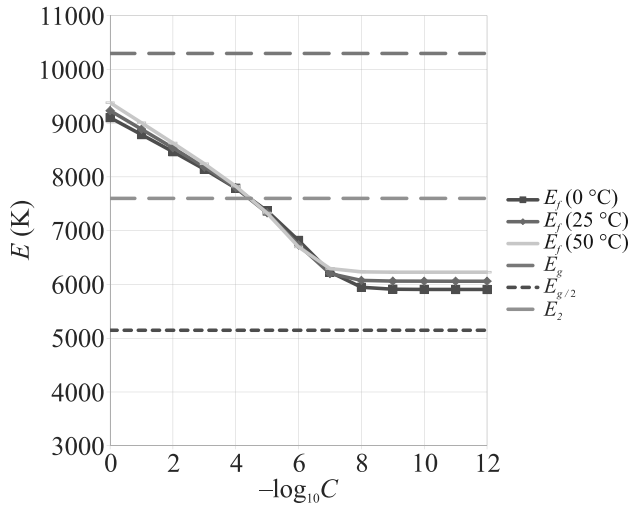


Рис. 1А. (Цветной онлайн) Энергия Ферми E_F (ордината в градусах Кельвина) для раствора уксуса в воде в функции от плотности доноров, т.е. примеси уксуса при разных температурах (темно-синий цвет – $T = 0^\circ\text{C}$; красный цвет – $T = 25^\circ\text{C}$; желтый цвет – $T = 505^\circ\text{C}$). В полупроводниках перемещения уровня Ферми по запрещенной зоне стимулируются вариациями температуры (см. [12]). В разбавленных растворах такие возможности лимитированы. Зато ничем не ограничены манипуляции с концентрацией доноров (уксуса), что и предпринято для иллюстрации свойства E_F . Из других обозначений, согласованных со схемой рис. 2: зеленый пунктир – положение дна зоны проводимости E_g ; коричневый пунктир отвечает середине запрещенной зоне, т.е. уровню $E_g/2$; голубой пунктир – положение уровня E_2 для уксуса в запрещенной зоне воды

и обе части (А.7) безразмерны.

Сравнение левой и правой сторон (А.7) с учетом (А.4) говорит о том, что константа A_1 из (А.4) имеет смысл энергетической щели в определении воды как собственного электролита,

$$2.3 \times A_1 = E_g^{aq} \simeq 10248 \text{ К.} \quad (\text{А.8})$$

Остатки формулы (А.7) связывают известные числа A_2 , A_3 с произведением $(N_+^* N_-^*)$.

$$-2.3(A_2 + A_3 T) = \ln \left[\frac{N_+^* N_-^*}{n_*^2} \right]. \quad (\text{А.9})$$

Как и ожидалось, первое из сопряжений, (А.7) определяет значение важного активационного параметра E_g^{aq} и связывает между собой величины эффективных значений N_+^* и N_-^* с числами A_2 , A_3 из определения (А.4) ионного произведения воды $K_{aq}(T)$.

Вторая связь между константами (N_-, N_+) и (K_{aq}, K_d) возникает асимптотически в зоне действия

приближения Освальда для статистики полупроводников n -типа и термодинамики разбавленных электролитов. С одной стороны, в области $N_d^- \gg H_+$ имеем из формул (6)–(8) основного текста (по аналогии с [13])

$$N_+ \simeq (2N_d N_+^0)^{1/2} \exp(-E_d/2T) \quad (\text{А.10})$$

с $E_d = (E_g - E_2)$.

С другой стороны, закон Освальда для разбавленных электролитов в форме [1, 6–9]

$$K_d = \frac{\alpha_d^2 C_d}{(1 - \alpha_d)},$$

где $[C_d]$ = моль/л, в пределе $\alpha_d = N_+/N_d \ll 1$ сводится к

$$\alpha_d^+ \simeq C_d^{-1/2} K_d^{1/2}. \quad (\text{А.11})$$

С целью дальнейшего использования (А.11) константа K_d снабжена индексом d .

Интересующее нас второе сопряжение, содержащее параметры (N_+^0, N_-^0) и (K_{aq}, K_d) , возникает сравнением формул (А.10), (А.11)

$$\left(\frac{2N_+^*}{N_d^*} \right)^{1/2} \exp(-E_d/2T) = C_d^{-1/2} K_d^{1/2},$$

$$N_d^* = \gamma N_d = C_d, \quad (\text{А.12})$$

или

$$(2N_+^*)^{1/2} \exp(-E_d/2T) = K_d^{1/2}. \quad (\text{А.12а})$$

Правильность избранного для сопряжения пути подчеркивается выпадением из (А.12а) параметра C_d . Кроме того, имеем в виду, что для водных растворов роль заряда, выбрасываемого с донора в зону проводимости играет положительная частица – протон.

Дальнейшее связано с эмпирическим представлением $K_d(T)$ [1]

$$-\log_{10} \tilde{K}_d(T) = +\frac{A_1^d}{T} + A_2^d + A_3^d T,$$

$$\tilde{K}_d(T) = K_d(T)/n_*, \quad (\text{А.13})$$

$$A_1 = 1170.48 \text{ К}, \quad A_2 = -3.1649, \quad A_3 = 0.013399. \quad (\text{А.13а})$$

Здесь где n_* – из (А.6), числа A_1^d , A_2^d , A_3^d , полученные в [1] для водного, разбавленного раствора уксуса.

Возводя обе части (А.12) в квадрат и пользуясь (А.13), находим для A_1^d связь

$$E_d^+ = 2.3 * A_1^d \simeq 2692 \text{ К} \quad (\text{А.14})$$

Остаток

$$\ln\left(\frac{2N_+^*}{n_*}\right) = -2.3(A_2^d + A_3^d T) \quad (\text{A.15})$$

дополнительно сопрягает N_+^* , N_-^* с числами $A_2^d + A_3^d$, в чем и хотелось убедиться.

Численные значения констант N_+^0 , N_-^0 , следующие из (A.9), (A.15), представлены на графиках рис. 3 основного текста. Энергия Ферми E_F из (6) с учетом данных для N_+^* , N_-^* “уксусного” происхождения (см. графики рис. 3), представлена на рис. 4.

1. R. Robinson and R. Stokes, *Electrolyte Solutions*, Butterworths Scientific Publications, London (1959).
2. A. Levchenko, A. Likhter, D. Khramov, V. Gryaznova, and V. Shikin, *Low. Temp. Phys.* **41**, 590 (2015).
3. А. Левченко, Л. Межов-Деглин, I. Chikina, В. Шикин *Физика низких температур* **45**, 965 (2019).
4. G. Lewis and M. Randall, *Thermodynamics and the Free Energy of Chemical Substances*, McGraw-Hill, N.Y., London (1923).
5. P. Debye and E. Huckel, *Phys. Z.* **24**, 185 (1923).
6. Г. Харнет, Б. Оуэн, *Физическая химия растворов и электролитов*, Издат. Инлит, М. (1952), 628 с.
7. С. Глестон, *Введение в электрохимию*, Иностранная Литература, М. (1951), 756 ср.
8. Р. Кубо, *Термодинамика*, Мир, М. (1970), 304 с.
9. Дж. Батлер, *Ионные равновесия*, Химия, Ленинград (1973), 446 с.
10. А. Ротинян, К. Тихонов, И. Шошина, *Теоретическая электрохимия*, Химия, Л. (1981), 423 с.
11. I. Chikina, *Low. Temp. Phys.* **48**, 661 (2022).
12. J. Blakemore, *Semiconductor Statistics*, Pergamon Press, Oxford, London, N.Y., Paris (1962).
13. Ч. Киттель, *Введение в физику твердого тела*, Физ-МатГиз, М. (1963), 696 с.
14. Л. Ландау, Е. Лифшиц, *Статистическая физика*, Физматлит, М. (1995), 605 с.
15. И. Пригожин, Д. Кондепуди, *Современная термодинамика*, Мир, М. (2002), 462 с.
16. В. Шикин, *ЖЭТФ* **123**, 859 (2016).
17. С. Wagner, *Phys. Z.* **25**, 474 (1924).
18. L. Onsager and N. Samaras, *J. Chem. Phys.* **2**, 528 (1934).
19. B. Deryagin and L. Landau, *ZhETF* **11**, 802 (1941).
20. E. Verwey and J. Overbeek, *Theory of the Stability of Lyophobic Colloids: The Interaction of Sol Particles Having an Electric Double Layers*, Elsevier, Amsterdam (1948).
21. N. Caranhan and K. Starling, *J. Chem. Phys.* **51**, 635 (1969).
22. E. Cousin, E. Dubois, and V. Cabuil, *Phys. Rev. E: Stat. Nonlinear Soft Matter Phys.* **68**, 021405 (2003).
23. E. Wanderman, A. Cebers, E. Dubois, G. Meriguet, A. Robert, and R. Penzynski, *Soft Matter* **9**, 11480 (2013).
24. R. Cabreira Gomes, A. Ferriera da Silva, W. Kouyate, G. Demouchy, G. Meriguet, R. Aquino, E. Dubois, S. Nakamae, M. Roger, J. Depeyort, and R. Perzynski, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20**, 16402 (2018).
25. K. Bhattacharya, M. Sarcar, T. Salez, S. Nakamae, G. Demouchy, and F. Cousin, *Chemengineering* **4**, 5 (2020).
26. J. Maxwell, *A Treatise of Electricity and Magnetism*, 3rd ed., Oxford University Press, London, UK (1892), v. 1, part II.
27. I. Lucas, S. Durand-Vidal, O. Bernard, V. Dahirel, E. Dubois, and J. Defreche, *Mol. Phys.* **112**, 1463 (2014).
28. T. Salez, B. Huang, M. Rietjens, M. Bonetti, C. Wiertel-Gasquet, M. Roger, and Cl. Filomeno, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 9409 (2017).
29. I. Chikina, V. Shikin, and A. Varlamov, *Entropy* **22**, 225 (2020).
30. E. Sani, M. Martina, T. Salez, S. Nakamae, E. Dubois, and V. Peyre, *Nanomateriales* **11**, 1031 (2021).
31. А. Введенков, А. Ларкин, *ЖЭТФ* **36**, 1133 (1959).
32. М. Рыжкин, И. Рыжкин, А. Клюев, *Письма в ЖЭТФ* **110**, 112 (2019).
33. J.-P. Hansen and I. McDonald, *Theory of Simple Liquids*, third edition, Academic Press, Elsevier (2005).
34. Z. Martin, Z. Bazant, K. Thornton, and A. Ajdari, *Phys. Rev. E* **70**, 021506 (2004).
35. I. Chikina, S. Nazin, and V. Shikin, *Europhys. Lett.* **80**, 26003 (2007).
36. I. Chikina, S. Nazin, and V. Shikin, *Physica B* **460**, 129 (2015).
37. I. Chikina and V. Shikin, *Low Temp. Phys.* **46**, 1108 (2020).
38. I. Chikina, B. Timofeev, and V. Shikin, *Low Temp. Phys.* **47**, 611 (2021).
39. F. Nadal, F. Argoul, P. Hanusse, B. Pouligny, and A. Ajdari, *Phys. Rev. E* **65**, 061409 (2002).
40. I. Chikina, S. Nakamae, V. Shikin, and A. Varlamov, *Colloids Interfaces* **6**, 25 (2022).

Температурно-индуцированный переход между режимами резистивного переключения мемристивных кроссбар-структур на основе парилена¹⁾

А. Н. Мацукатова^{+,2)}, А. Д. Трофимов^{+,×}, А. В. Емельянов^{+,×}

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

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

[×]Московский физико-технический институт, 141701 Долгопрудный, Россия

Поступила в редакцию 20 июля 2023 г.

После переработки 1 августа 2023 г.

Принята к публикации 1 августа 2023 г.

Для создания нейроморфных вычислительных систем (НВС), способных эффективно решать задачи искусственного интеллекта, необходимы элементы с кратко- и долгосрочными эффектами памяти. Мемристоры являются перспективными кандидатами для реализации таких элементов, так как демонстрируют волатильные и неволатильные режимы резистивного переключения (РП). Представляют интерес структуры, в которых возможна реализация обоих режимов РП в одном устройстве. В данной работе исследованы нанокompозитные мемристоры на основе парилена с наночастицами MoO_3 в удобной для построения НВС кроссбар-архитектуре. Для таких структур был обнаружен обратимый температурно-индуцированный переход между волатильным и неволатильным режимом РП при подбore либо локальной, контролируемой током ограничения, либо внешней температуры. Кроме того, элементы кроссбар-структур показали высокую выносливость к циклическим РП, возможность удержания состояний в неволатильном режиме и многоуровневый характер РП. Полученные результаты открывают возможности для использования кроссбар-структур на основе парилена в биоподобных НВС.

DOI: 10.31857/S1234567823170081, EDN: kafcdv

Нейроморфные вычислительные системы (НВС), организованные в сверхпараллельные архитектуры соединения нейронов (вычислительных элементов) посредством синапсов (элементов памяти), привлекают большое внимание исследователей в связи с их низким энергопотреблением, биоподобностью и возможностью обойти ограничения стандартной архитектуры фон Неймана. Несмотря на улучшенную архитектуру НВС, для их аппаратной реализации на стандартной комплементарной базе необходимо большое количество транзисторов [1]. Поэтому в последние годы активно исследуются так называемые мемристоры, которые могут эмулировать и нейроны [2], и синапсы [3]. Мемристор (“сопротивление с эффектом памяти”) представляет собой многослойную структуру, которая способна изменять свое состояние в некотором резистивном окне от высокоомного состояния R_{off} до низкоомного R_{on} в зависимости от приложенного порогового напряжения и/или про-

текшего через нее электрического заряда. Большинство перспективных мемристивных структур переключается посредством формирования/разрушения проводящих мостиков (филаментов) в диэлектрическом активном слое, такие структуры называются филаментарными [4]. После того как металлический филамент сформировался, он может самопроизвольно разорваться. В различных мемристивных структурах “время жизни” филамента варьируется от микросекунд до нескольких месяцев или даже лет [5]. В зависимости от времени жизни филамента условно выделяют волатильный (энергозависимый, филамент начинает разрушаться без внешнего воздействия) и неволатильный (энергонезависимый, филамент сохраняет свое состояние без внешнего воздействия в течение длительного времени) режим функционирования мемристора. Волатильные мемристоры используются, например, для реализации нейронов в НВС [6] или резервуарных вычислений [7], неволатильные мемристоры – для реализации синапсов в НВС [8]. Кроме этого, филаментарные мемристоры разделяют на две группы в за-

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

²⁾e-mail: an.matcukatova@physics.msu.ru

висимости от типа образующегося филамента: мемристоры с металлическим филаментом функционируют по механизму электрохимической металлизации (*electrochemical metallization*, ЕСМ), а с филаментом из кислородных вакансий - по механизму изменения валентности (*valence change mechanism*, VCM). Обратимся подробнее к описанию волатильных и неволатильных ЕСМ мемристоров.

Режим работы ЕСМ мемристора в литературе обычно связывают с эффективной толщиной филамента. При этом реальная толщина филамента может как оставаться неизменной по всей длине [9], так и изменяться [10]. Эффективная же толщина филамента зависит от количества металлических ионов, поступающих в активный слой ЕСМ мемристоров. Так авторы в работе [11] показали, что при изменении размеров и концентрации наночастиц серебра между верхним контактом и диэлектрическим активным слоем можно контролировать режим резистивного переключения (РП) мемристивных структур. Однако в некоторых ЕСМ мемристивных структурах волатильный и неволатильный режимы сосуществуют, и между ними возможен обратимый температурно-индуцированный переход при подборе локальной (внутренней), контролируемой током ограничения (*compliance current*, I_{cc}) [12], и/или внешней температуры [13]. Возможность выбора режима РП открывает новые перспективы внедрения ЕСМ мемристивных устройств в НВС.

В данной работе исследуется возможность перехода между режимами РП мемристоров на основе парилена (поли-*n*-ксилилена, ППК). Мемристивные структуры на основе ППК переключаются по ЕСМ механизму, демонстрируют хорошую пластичность и удержание резистивных состояний, их проводимость может изменяться по правилам пластичности, зависящей от времени прихода импульсов (STDP 1-го порядка) [14, 15]. Более того, для ППК мемристоров было выявлено влияние биоподобных эффектов 2-го порядка, с помощью которых удалось продемонстрировать изменение проводимости по правилу STDP 2-го порядка, которое наиболее похоже на правило изменения синаптического веса в биологических системах [16]. Главной причиной проявления эффектов 2-го порядка является изменение локальной температуры проводящего филамента. В связи с этим также интересно исследование возможности температурно-индуцированного перехода между волатильным и неволатильным режимами РП в ППК мемристорах.

Всем филаментарным мемристорам, и ППК мемристорам в их числе, свойствен один принци-

пиальный недостаток. Микроскопические вариации в морфологии филамента могут привести к значительной вариативности макроскопических мемристивных характеристик, что является одним из основных препятствий к применению филаментарных мемристоров в НВС. Поэтому для дальнейшего лабораторного, а затем и промышленного использования мемристоров в НВС необходим контроль морфологии филамента и предсказуемость поведения мемристора в целом. Многообещающим способом стабилизации процесса РП является инженерия дефектов (*defect engineering*) [17]. Уже была показана возможность улучшения характеристик ППК мемристоров посредством внедрения в структуру барьерного графенового слоя [18]. В таких мемристорах металлические ионы верхнего контакта могут диффундировать в слой ППК только через нанопоры, присутствующие в структуре графена, таким образом задается направление образования металлических филаментов, а вариативность РП снижается. Кроме этого, были продемонстрированы ППК мемристоры с внедренными наночастицами серебра [19]. Снижение вариативности в данном случае происходит в связи с концентрацией поля наночастицами серебра и формированием перколяционных цепочек, которые задают направления образования проводящих филаментов. В данной работе предложены мемристоры на основе ППК с внедренными наночастицами MoO_3 (ППК- MoO_3). Исследуемые мемристоры реализованы в кроссбар архитектуре, эффективно выполняющей наиболее ресурсоемкую операцию для традиционных вычислительных систем, векторно-матричное умножение. Так как триоксид молибдена является фоточувствительным полупроводником, успешная реализация мемристоров ППК- MoO_3 в кроссбар-архитектуре позволяет надеяться на возможность создания оптоэлектронной памяти на основе полученных структур в будущем.

Было изготовлено три ППК- MoO_3 кроссбар-структуры 8×4 с различной толщиной нанокompозитного слоя: 930 (#1), 520 (#2) и 330 нм (#3). Погрешность толщины нанокompозитного слоя в рамках одного мемристивного устройства составила 20 нм. Образцы представляли собой сэндвич-структуру $\text{Cu}/\text{ППК-}\text{MoO}_3/\text{Au}$ на подложке SiO_2/Si (см. вставку к рис.1). Нижние золотые электроды (8 шт.) шириной 35 мкм были получены с помощью оптической литографии по методике, описанной в [20]. Синтез нанокompозитного слоя ППК был выполнен методом газофазной полимеризации, подробнее процесс синтеза описан в

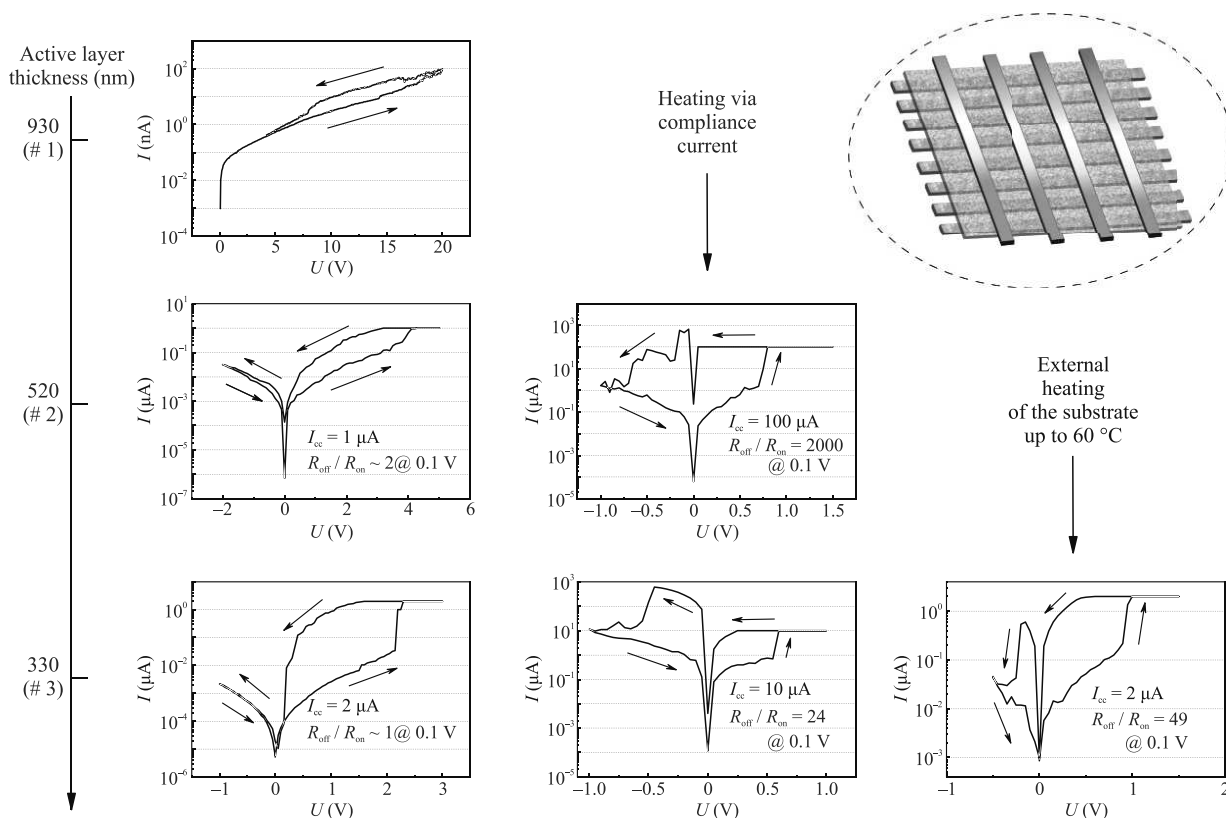


Рис. 1. (Цветной онлайн) Медианные ВАХи для кроссбар-структур ППК- MoO_3 с различной толщиной нанокомпозитного слоя и изменение режима их РП в зависимости от внешних параметров: волатильный режим при комнатной температуре и низком I_{cc} (первый столбец), неволатильный режим при комнатной температуре и высоком I_{cc} (второй столбец), а также при повышенной температуре и низком I_{cc} (третий столбец). На вставке: схематическое изображение исследуемых кроссбар-структур с 4 верхними медными электродами, 8 нижними золотыми электродами и нанокомпозитным слоем между ними

[21] с тем отличием, что мишень для наполнителя была из MoO_3 . Концентрация MoO_3 составляла 10 об. %. Верхние медные электроды (4 шт.) шириной 300 мкм были получены магнетронным распылением с использованием специальной теневой маски.

Мемристивные характеристики исследовались с помощью аналитической зондовой станции 3S SWIN EPS4. Импульсы напряжения подавались на верхний электрод при заземленном нижнем электроде от источника-измерителя Keithley 2636B. Вольтамперные характеристики (ВАХи) измерялись со скоростью развертки 0.5 В/с с шагом в 0.05 В. Все измерения были автоматизированы с помощью программ, написанных в среде LabView. В некоторых экспериментах осуществлялся внешний нагрев подложки с помощью блока управления температурой ATT Systems Control Unit A200. Толщина активного слоя кроссбар-структур была определена с помощью сканирующего/просвечивающего электронного микроскопа Osiris (Thermo Fisher Scientific).

Рисунок 1 демонстрирует типичные ВАХи для всех исследованных кроссбар-структур. В первом столбце рис.1 показаны волатильные РП образцов (R_{on} состояние переходит в R_{off} при положительном напряжении), кроме структуры #1, для которой не наблюдается переключения из R_{off} в R_{on} при приложении внешнего напряжения. Отсутствие РП можно объяснить большой толщиной активного слоя, вследствие чего затруднены дрейф и диффузия катионов металла к нижнему электроду. Во втором столбце рис.1 показаны неволатильные РП (R_{on} состояние переходит в R_{off} при отрицательном напряжении) структур #2 и #3 при увеличенном I_{cc} (в 100 и 5 раз соответственно). Ток ограничения в данном случае необходим для предотвращения теплового разрушения мемристоров. Поэтому I_{cc} для демонстрации неволатильных РП кроссбар-структуры #3 был значительно уменьшен, в сравнении со структурой #2, в связи с ее меньшей толщиной. Примечательно, что

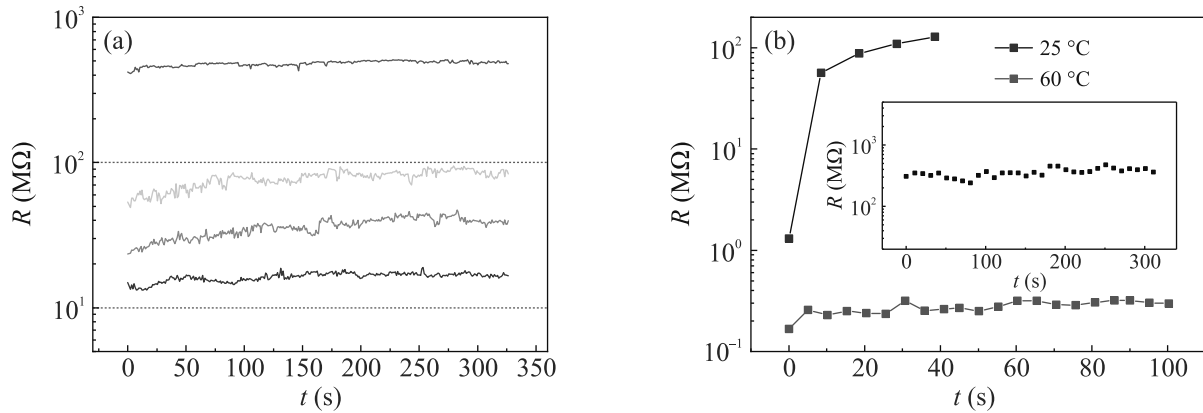


Рис. 2. (Цветной онлайн) Пример удержания резистивных состояний элемента кроссбар-структуры #3 при (a) – высоком I_{cc} и комнатной температуре или (b) – высокой температуре и низком I_{cc} (красная линия). Черная линия демонстрирует волатильный режим при низком I_{cc} и комнатной температуре. На вставке: демонстрация удержания R_{off} состояния при низком I_{cc} и комнатной температуре

для кроссбар-структуры #3 удалось продемонстрировать неволатильные РП не только путем увеличения I_{cc} , но и нагревом подложки до 60 °С без увеличения I_{cc} относительно волатильного режима (третий столбец рис. 1). Можно предположить, что именно уменьшенная толщина активного слоя привела к возможности перехода между режимами РП с помощью внешнего нагрева структуры. Таким образом, была показана возможность температурно-индуцированного перехода между режимами РП кроссбаров ППК-МоО₃ в зависимости от I_{cc} и внешней температуры.

Переход между режимами РП был подтвержден контролем резистивных состояний в течение некоторого времени после их установки с помощью алгоритма записи-чтения (*write-verify*) [22]. Обнаружено, что резистивные состояния удерживаются, если они были установлены при высоком I_{cc} (рис. 2a) или высокой внешней температуре (рис. 2b). На рисунке 2b видно, что измерения при комнатной температуре и низком I_{cc} приводят к возвращению мемристора в волатильный режим, за несколько секунд он переходит из R_{on} в R_{off} состояние. Стоит отметить, что волатильный режим всегда приводил к переключению мемристора из R_{on} в R_{off} состояние, в то время как состояние R_{off} могло храниться длительное время без значительных изменений (вставка к рис. 2b). Таким образом, только R_{on} состояние мемристора ППК-МоО₃ является нестабильным, что типично для ЕСМ волатильных мемристоров: образуется нестабильный тонкий металлический филамент, который самопроизвольно разрывается вследствие поверхностной диффузии атомов металла для минимизации энергии поверхностного натяжения [5].

Другая важная характеристика для всех мемристивных устройств – выносливость (*endurance*), т.е. количество стабильных циклов РП без деградации структуры. На рисунке 3 видно, что элементы кроссбар-структур выдерживают более 1000 циклов РП без уменьшения резистивного окна R_{off}/R_{on} .

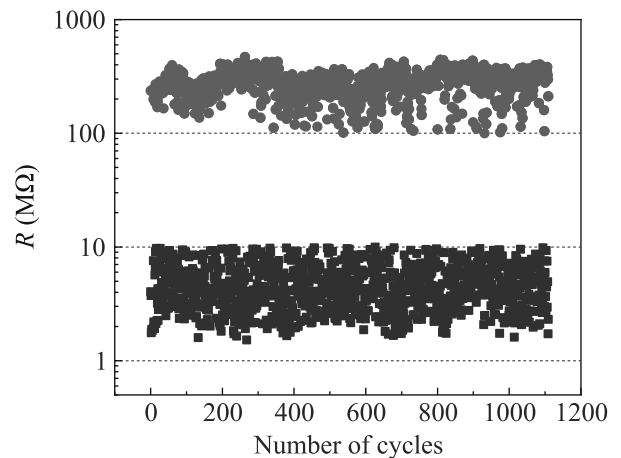


Рис. 3. (Цветной онлайн) Выносливость типичного элемента кроссбар-структуры #3

Обсудим механизм РП мемристивных кроссбар-структур на основе ППК-МоО₃. Исследуемые структуры переключаются по механизму ЕСМ, как и мемристоры на основе чистого ППК, т.е. с образованием/разрывом медного филамента. Ожидается, что филаменты преимущественно состоят из меди в связи с ее большей активностью [23, 24] и переключением мемристоров из R_{off} в R_{on} состояние при приложении положительного напряжения именно на верхний медный электрод. При приложении внешнего поля и

использовании малого тока ограничения без дополнительного нагрева подложки ионизация атомов металла верхнего электрода и последующие дрейф и диффузия металлических катионов приводят к образованию тонкого нестабильного филамента (рис. 4а).

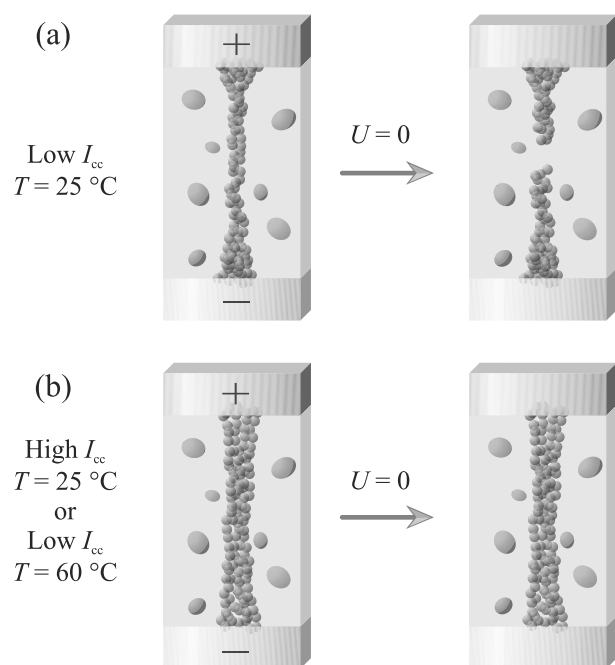


Рис. 4. (Цветной онлайн) Качественное объяснение механизма РП исследуемых мемристивных структур в волатильном (а) и неволатильном режиме (б)

Такой филамент самопроизвольно разрывается в отсутствие внешнего поля в связи с его высокой удельной поверхностной энергией. С другой стороны, увеличение внешней или внутренней температуры способствует образованию большого количества металлических катионов и их более активной диффузии в нанокompозитный слой, что приводит к образованию стабильного филамента (рис. 4б). Такой филамент не разрывается самопроизвольно, в данном случае необходимо приложить напряжение обратной полярности к верхнему контакту мемристивной структуры для его разрыва. Стоит отметить, что внедрение наночастиц (как Ag, так и MoO_3) в слой ППК уменьшает разброс мемристивных характеристик. При этом в структурах на основе ППК-Ag, в отличие от ППК- MoO_3 , реализуется многофиламентный характер резистивных переключений [21]. При таком характере переключений сложнее обнаружить проявление температурно-индуцированных эффектов, так как они должны проявиться сразу во всех образованных мостиках. Переключение мемристоров ППК- MoO_3

путем образования/разрыва одного филамента (или небольшого их количества) подтверждается отсутствием зависимости состояния R_{on} от площади контактов (см. дополнительные материалы).

Итак, в данной работе были продемонстрированы новые нанокompозитные мемристоры на основе ППК- MoO_3 в удобной для построения НВС кроссбар-архитектуре. Для кроссбар-структуры с оптимальной толщиной активного нанокompозитного слоя был обнаружен обратимый температурно-индуцированный переход между волатильным и неволатильным режимом РП при подборе как локальной, контролируемой I_{cc} , так и внешней температуры. Кроме этого, были исследованы важные для нейроморфных применений мемристивные характеристики: мемристоры показали хорошую выносливость (более 1000 циклов РП), удержание состояний в неволатильном режиме и пластичность (не менее 4 различных резистивных состояний). Полученные результаты создают задел для использования кроссбар-структур на основе ППК- MoO_3 в будущих биоподобных нейроморфных вычислительных системах.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта Российского научного фонда (# 20-79-10185). А. Н. Мацукатова является стипендиатом Фонда развития теоретической физики и математики “БАЗИС” (# 19-2-6-57-1).

Авторы выражают благодарность А. А. Несмелову и С. А. Завьялову за помощь в синтезе мемристивных структур. Измерения выполнены с использованием оборудования Ресурсных центров при поддержке НИЦ “Курчатовский институт”.

1. P. A. Merolla, J. V. Arthur, R. Alvarez-Icaza et al. (Collaboration), *Science* **345**, 668 (2014).
2. S. Kumar, R. S. Williams, and Z. Wang, *Nature* **585**, 518 (2020).
3. Y. Zhang, Z. Wang, J. Zhu, Y. Yang, M. Rao, W. Song, Y. Zhuo, X. Zhang, M. Cui, L. Shen, R. Huang, and J. J. Yang, *Appl. Phys. Rev.* **7**, 011308 (2020).
4. L. Yuan, S. Liu, W. Chen, F. Fan, and G. Liu, *Adv. Electron. Mater.* **7**, 2100432 (2021).
5. W. Wang, M. Wang, E. Ambrosi, A. Bricalli, M. Laudato, Z. Sun, X. Chen, and D. Ielmini, *Nat. Commun.* **10**, 81 (2019).
6. M. D. Pickett, G. Medeiros-Ribeiro, and R. S. Williams, *Nat. Mater.* **12**, 114 (2013).
7. A. N. Matsukatova, N. V. Prudnikov, V. A. Kulagin et al. (Collaboration), *Adv. Intell. Syst.* **5**, 2200407 (2023).
8. S. Shchanikov, A. Zuev, I. Bordanov, S. Danilin, V. Lukoyanov, D. Korolev, A. Belov, Y. Pigareva,

- A. Gladkov, A. Pimashkin, A. Mikhaylov, V. Kazantsev, and A. Serb, *Chaos, Solitons and Fractals* **142**, 110504 (2021).
9. T. Luijbrand, A. Bercher, R. Rocco et al. (Collaboration), *Phys. Rev. Research* **5**, 013108 (2023).
10. S. Balatti, S. Larentis, D.C. Gilmer, and D. Ielmini, *Adv. Mater.* **25**, 1474 (2013).
11. S. E. Kim, M.-H. Kim, J. Jang, H. Kim, S. Kim, J. Jang, J.-H. Bae, I. M. Kang, and S.-H. Lee, *Adv. Intell. Syst.* **4**, 2200110 (2022).
12. H. Sun, Q. Liu, C. Li, S. Long, H. Lv, C. Bi, Z. Huo, L. Li, and M. Liu, *Adv. Funct. Mater.* **24**, 5679 (2014).
13. Q. Tian, X. Chen, X. Zhao, Z. Wang, Y. Lin, Y. Tao, H. Xu, and Y. Liu, *Appl. Phys. Lett.* **122**, 153502 (2023).
14. A. A. Minnekhanov, B. S. Shvetsov, M. M. Martyshev, K. E. Nikiruy, E. V. Kukueva, M. Yu. Presnyakov, P. A. Forsh, V. V. Rylkov, V. V. Erokhin, V. A. Demin, and A. V. Emelyanov, *Org. Electron.* **74**, 89 (2019).
15. A. A. Minnekhanov, A. V. Emelyanov, D. A. Lapkin, K. E. Nikiruy, B. S. Shvetsov, A. A. Nesmelov, V. V. Rylkov, V. A. Demin, and V. V. Erokhin, *Sci. Rep.* **9**, 10800 (2019).
16. А. Н. Мацукатова, А. В. Емельянов, А. А. Миннеханов, В. А. Демин, В. В. Рыльников, П. А. Форш, П. К. Кашкаров, *Письма в ЖЭТФ* **112**, 379 (2020).
17. W. Banerjee, Q. Liu, and H. Hwang, *J. Appl. Phys.* **127**, 051101 (2020).
18. Q. Chen, M. Lin, Z. Wang, X. Zhao, Y. Cai, Q. Liu, Y. Fang, Y. Yang, M. He, and R. Huang, *Mater.* **5**, 1800852 (2019).
19. А. Н. Мацукатова, А. В. Емельянов, А. А. Миннеханов, Д. А. Сахарутов, А. Ю. Вдовиченко, Р. А. Камышинский, В. А. Демин, В. В. Рыльников, П. А. Форш, С. Н. Чвалун, П. К. Кашкаров, *Письма в журнал технической физики* **46**, 25 (2020) [A. N. Matsukatova, A. V. Emelyanov, A. A. Minnekhanov, D. A. Sakharutov, A. Yu. Vdovichenko, R. A. Kamyshinskii, V. A. Demin, V. V. Rylkov, P. A. Forsh, S. N. Chvalun, and P. K. Kashkarov. *Tech. Phys. Lett.* **46**, 73 (2020)].
20. B. S. Shvetsov, A. A. Minnekhanov, A. V. Emelyanov, A. I. Ilyasov, Y. V. Grishchenko, M. L. Zhanavskii, A. A. Nesmelov, D. R. Streletsov, T. D. Patsaev, A. L. Vasiliev, V. V. Rylkov, and V. A. Demin, *Nanotechnology* **33**, 255201 (2022).
21. A. N. Matsukatova, A. Y. Vdovichenko, T. D. Patsaev, P. A. Forsh, P. K. Kashkarov, V. A. Demin, and A. V. Emelyanov, *Nano Res.* **16**, 3207 (2023).
22. K. E. Nikiruy, A. V. Emelyanov, V. A. Demin, V. V. Rylkov, A. V. Sitnikov, and P. K. Kashkarov, *Tech. Phys. Lett.* **44**, 416 (2018).
23. N. Ge, M.-X. Zhang, L. Zhang, J. J. Yang, Z. Li, and R. S. Williams, *Semicond. Sci. Technol.* **29**, 104003 (2014).
24. P. Praveen, T. P. Rose, and K. J. Saji, *Microelectronics J.* **121**, 105388 (2022).

Температурные исследования спектров комбинационного рассеяния света в магнитных топологических изоляторах MnBi_2Te_4 и MnSb_2Te_4

А. А. Максимов^{a,1)}, И. И. Тартаковский^a, З. С. Алиев^b, И. Р. Амирасланов^{c,b}, Н. А. Абдуллаев^{b,c}, В. Н. Зверев^a,
З. А. Джахангирли^{c,b}, И. Ю. Складнева^d, М. М. Отроков^{e,f}, Н. Т. Мамедов^{b,c,1)}, Е. В. Чулков^{g,h}

^aИнститут физики твердого тела им. Ю. А. Осипяна РАН, 142432 Черноголовка, Россия

^bБакинский государственный университет, AZ1148 Баку, Азербайджан

^cИнститут физики, AZ1141 Баку, Азербайджан

^dТомский государственный университет, 634050 Томск, Россия

^eCentro de Fisica de Materiales (CFM-MPC), Centro Mixto CSIC-UPV/EHU, 20018 Donostia-San Sebastian, Basque Country, Spain

^fIKERBASQUE, Basque Foundation for Science, 48011 Bilbao, Spain

^gСанкт-Петербургский государственный университет, 198504 С.-Петербург, Россия

^hDepartamento de Polimeros y Materiales Avanzados: Fisica, Quimica y Tecnologia, Facultad de Ciencias Quimicas, Universidad del Pais Vasco UPV/EHU, 20080 San Sebastian/Donostia, Basque Country, Spain

Поступила в редакцию 25 июля 2023 г.

После переработки 8 августа 2023 г.

Принята к публикации 8 августа 2023 г.

Подробно изучены спектры комбинационного рассеяния света в кристаллах магнитных топологических изоляторов в широком диапазоне температур, включающим область магнитного упорядочения. Определены параметры ангармонизма и модовые параметры Грюнайзена активных в комбинационном рассеянии фононов в изученных кристаллах. Показано, что с точностью до $\pm 0.1 \text{ см}^{-1}$ температурная зависимость частоты $A_{1g}^{(1)}$ фонона с частотой $\sim 48 \text{ см}^{-1}$ в MnBi_2Te_4 не отличается от стандартной ангармонической модели, не учитывающей спин-фононного взаимодействия. Поляризационные зависимости спектров комбинационного рассеяния в кристаллах MnSb_2Te_4 указывают, что в них, в отличие от изоструктурных кристаллов MnBi_2Te_4 , происходит значительное взаимное перемешивание атомов под решеток Sb и Mn.

DOI: 10.31857/S1234567823170093, EDN: kamhun

Реализация магнитного порядка в функциональных квантовых материалах создает богатую платформу для исследования фундаментальных спиновых явлений, примерами которых являются сильно коррелированные материалы [1], мультиферроики [2] и недавно открытые магнитные топологические материалы [3–5]. Такие материалы имеют большие перспективы для применения в спинтронике, устройствах магнитной памяти и квантовых информационных технологиях.

Введение магнетизма в топологические изоляторы нарушает симметрию обращения времени, и магнитное обменное взаимодействие открывает щель в топологических поверхностных состояниях, которые в противном случае были бы бесщелевыми. Это мо-

жет приводить к различным новым топологическим квантовым состояниям, таким как квантовый аномальный эффект Холла (QANE) или состояние аксионного изолятора. Допирование магнитными атомами немагнитного топологического изолятора и эффекты магнитной близости являются естественными способами для введения в них магнетизма. Экспериментально режим аномального квантового эффекта Холла был реализован в легированной хромом пленке топологического изолятора $(\text{Bi}, \text{Sb})_2\text{Te}_3$ лишь при низких температурах, не превышающих 30 мК [6], поскольку из-за неоднородного распределения магнитных атомов магнитная щель нерегулярно менялась вдоль поверхности образца [7].

Появление первого собственного антиферромагнитного топологического изолятора MnBi_2Te_4 с температурой Нееля 25.4 К [4] продемонстрировало но-

¹⁾e-mail: maksimov@issp.ac.ru; n.mamedov.physics@bsu.edu.az

вый и эффективный способ включения магнетизма в топологических изоляторах с большой магнитной щелью и однородным магнитным упорядочением. Это открывает хорошие перспективы для потенциальных приложений в электронике с низким энергопотреблением и дальнейших исследований аномального квантового эффекта Холла и новых топологических состояний, таких как состояния аксионного изолятора, при более высоких температурах.

Слоистые кристаллы MnBi_2Te_4 и MnSb_2Te_4 демонстрируют при температурах $\sim 25\text{--}30\text{ К}$ переходы в магнитоупорядоченное состояние (антиферромагнитное в MnBi_2Te_4 и ферромагнитное в MnSb_2Te_4) и являются первыми экспериментальными реализациями внутреннего магнитного порядка в трехмерных топологических изоляторах. Поскольку в этих материалах межслойный магнитный порядок тесно связан с топологией зон, это может открыть новые, эффективные пути связи между межслоевым обменом и другими микроскопическими степенями свободы.

Целью настоящей работы были подробное изучение спектров комбинационного рассеяния (КР) света в кристаллах магнитных топологических изоляторов в широком диапазоне температур, включающим область магнитного упорядочения, определение ангармонических параметров изученных кристаллов и исследования возможного влияния спин-фононного взаимодействия на частоты фононов [8, 9].

Исследованные монокристаллы MnBi_2Te_4 и MnSb_2Te_4 имели форму тонких пластинок с линейными размерами до нескольких миллиметров и толщиной $\sim 50\text{--}100\text{ мкм}$). Технология выращивания монокристаллов MnBi_2Te_4 подробно описана ранее [4, 10]. Монокристаллы MnSb_2Te_4 были получены по той же технологии роста с несколько измененными параметрами выращивания. На рисунке 1 для сравнения приведены дифрактограммы, полученные для исследованных образцов обоих соединений на рентгеновском дифрактометре BRUKER XRD D2 Phaser (Cu , $K_{\alpha 1}$; $5 < 2\theta < 100^\circ$). Фазовый состав и структурный анализ образцов проводился с использованием программных пакетов EVA и TOPAS-4.2. Приведенные дифрактограммы полностью соответствуют рассчитанным и подтверждают тетрадемитную структуру $R\bar{3}m$ каждого из соединений. Следует отметить, что качество полученных дифрактограмм для исследованных образцов MnSb_2Te_4 заметно лучше, чем приведенных в недавней работе [11] для этого соединения.

Спектры КР света в кристаллах MnBi_2Te_4 и MnSb_2Te_4 исследовались при возбуждении HeNe лазером с длиной волны излучения 632.817 нм .

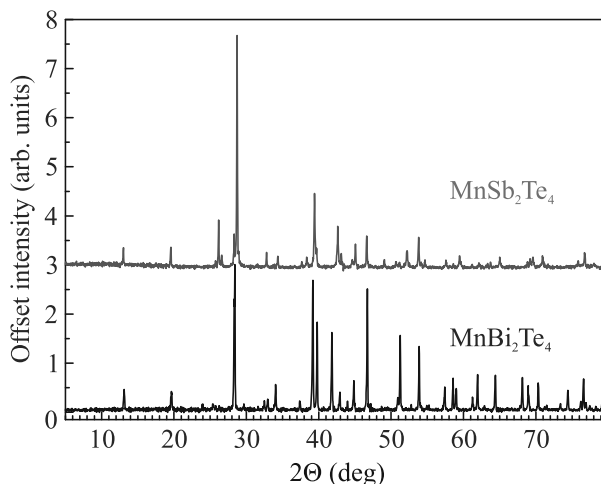


Рис. 1. (Цветной онлайн) Рентгеновские дифрактограммы изученных кристаллов, сдвинутых по оси интенсивности для наглядности: нижняя — MnBi_2Te_4 , верхняя — MnSb_2Te_4

Лазерное излучение мощностью, не превышающей $\sim 10\text{ мВт}$, фокусировалось на однородном участке поверхности образца в пятно диаметром $\sim 100\text{ мкм}$. Такая плотность мощности лазера не вызывала изменений спектров КР при любых временах экспозиции, которые могли меняться от нескольких минут до получаса, для регистрации спектров. Образцы помещались в оптический гелиевый криостат с регулируемой температурой от 4.2 К до комнатной с точностью $\sim 0.1\text{ К}$. Спектры КР регистрировались в направлении, близком к нормали к поверхности образца с помощью спектрального прибора DilorXY 500, оснащенного охлаждаемым CCD детектором.

Пример спектров КР света в кристаллах MnBi_2Te_4 , измеренных при различных температурах, показан на рис. 2. На представленных спектрах можно видеть линии, связанные с рассеянием на различных активных в КР света оптических фононах. Экспериментально впервые надежно зафиксирована и измерена температурная зависимость поведения самой низкочастотной КР-активной моды $E_g^{(1)}$ с частотой $\sim 27\text{ см}^{-1}$, которая была впервые теоретически предсказана в [10].

В настоящей работе было уделено особенно тщательное внимание к измерениям зависимости частоты фонона $A_{1g}^{(1)}$, отмеченного на рис. 2 стрелкой, от температуры. Хорошо известно [12], что зависимость частот фононов $\omega(T)$ при изменении температуры T от гелиевых до комнатных, связанная с ангармонизмом, может быть хорошо описана с помощью формулы, учитывающей трехфононные взаимодействия

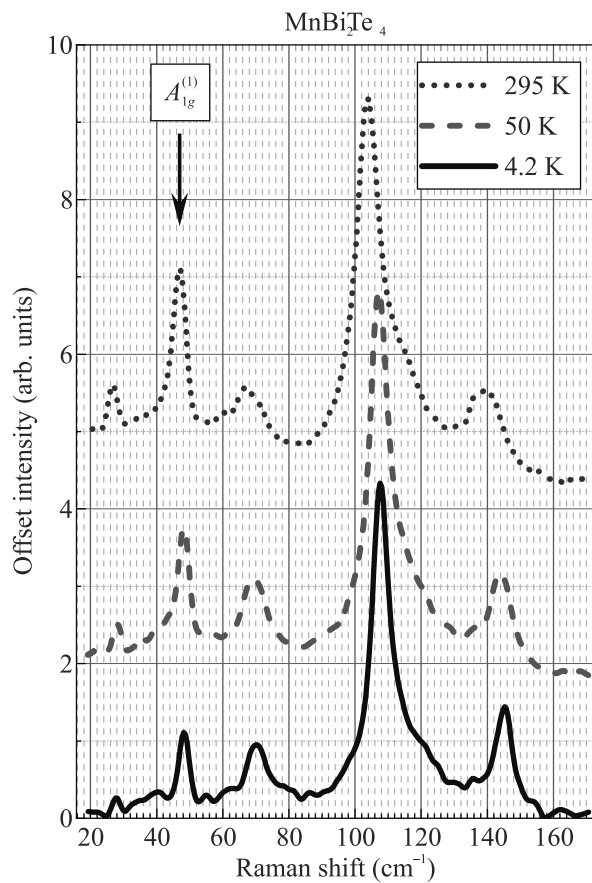


Рис. 2. (Цветной онлайн) Спектры КР кристалла MnBi_2Te_4 , измеренные при различных температурах: сплошная кривая – 4.2, пунктирная – 50 и точечная – 295 K. Спектры сдвинуты по оси интенсивности для наглядности

$$\omega(T) = \omega_0 + \delta\omega \times \left[1 + \frac{2}{\exp(\hbar\omega_0/2k_B T) - 1} \right]. \quad (1)$$

Здесь $\omega_0 + \delta\omega$ – частота фонона при нулевой температуре, отношение $\delta\omega/\omega_0$ определяет наклон практически линейной зависимости $\omega(T)$ при высоких температурах, а $\hbar$ и k_B – постоянные Планка и Больцмана, соответственно. В принципе, при наличии достаточно сильного спин-фононного взаимодействия в области температур ниже температуры магнитного упорядочения может наблюдаться отклонение зависимости частоты фонона от температуры $\omega(T)$ от зависимости, описываемой формулой (1).

В работе [8] было сделано утверждение, что частота $A_{1g}^{(1)}$ фонона с частотой $\sim 48 \text{ см}^{-1}$ в кристаллах MnBi_2Te_4 при температурах ниже температуры перехода в антиферромагнитное состояние увеличивается на величину $\sim 0.3 \text{ см}^{-1}$ по сравнению с зависимостью по формуле (1), что связывалось с проявлением спин-фононного взаимодействия, которое

согласно их расчетам является максимальным как раз для этого фонона. С другой стороны, ровно противоположное экспериментальное утверждение было сделано в работе [9], где наблюдалось примерно такое же по величине смягчение (уменьшение) частоты этого фонона при низких температурах. Следует заметить, что столь малые отклонения частоты $A_{1g}^{(1)}$ фонона от стандартного ангармонического поведения требует определения частоты с очень высокой точностью. При этом точность определения частоты $A_{1g}^{(1)}$ фонона в работах [8, 9] находилась на пределе экспериментальных возможностей, превышая в том числе и спектральное разрешение, которое было не менее $\sim 0.5 \text{ см}^{-1}$.

Одним из основных факторов, определяющих точность определения частоты при математической обработке полученных экспериментальных спектров, является их качество, т.е. высокое отношение сигнала (интенсивности КР) к шуму. С другой стороны, учитывая не слишком большую величину интенсивности спектров КР исследуемых кристаллов MnBi_2Te_4 , достижение в эксперименте высокого отношения сигнал/шум требует большого времени накопления. Это может привести к проявлению долгосрочной, пускай даже слабой, нестабильности калибровки спектральных приборов, что, в свою очередь, может вызывать дополнительную ошибку при определении частоты фонона при проведении экспериментов при различных температурах.

Нами были выполнены тщательные измерения спектров КР MnBi_2Te_4 кристаллов при различных температурах от гелиевой до комнатной с высокой точностью определения спектрального положения полос КР света при спектральном разрешении $\lesssim 0.5 \text{ см}^{-1}$. Для повышения точности определения частоты фононов одновременно с регистрацией спектров КР, в оптический путь установки посылался свет сравнимой с КР интенсивности от калибровочной Ne лампы низкого давления. Таким образом, спектр калибровочной лампы, состоящий из известных узких линий и измеренный одновременно с изучаемым спектром КР, позволял существенно повысить точность определения частот фононов с применением соответствующей математической обработки.

На рисунке 3 точками представлена определенная таким образом зависимость частоты максимума полосы КР на фоне $A_{1g}^{(1)}$ в широком температурном интервале, захватывающим область магнитного упорядочения. Сплошная кривая отвечает зависимости по формуле (1), с параметрами, определенными по методу наименьших квадратов. На вставке рис. 3 показаны те же зависимости в низко-

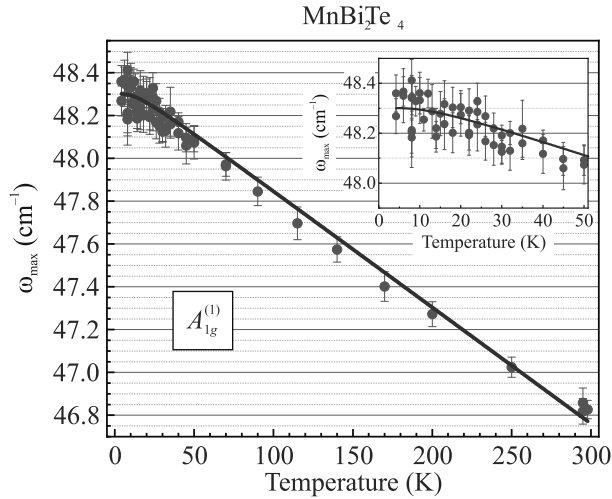


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость частоты фонона $A_{1g}^{(1)}$ в кристаллах MnBi_2Te_4 (точки). Сплошная кривая получена по формуле (1) с параметрами $\omega_0 \approx 48.4 \text{ см}^{-1}$ и $\delta\omega \approx -0.094 \text{ см}^{-1}$ для наилучшего согласия с экспериментальными данными

температурной области. Видно, что с точностью до $\pm 0.1 \text{ см}^{-1}$ температурная зависимость частоты $A_{1g}^{(1)}$ фонона с частотой $\sim 48 \text{ см}^{-1}$ в MnBi_2Te_4 не отличается от стандартной ангармонической модели, не учитывающей спин-фононного взаимодействия. Это означает, что полученные в работах [8, 9] оценки величины спин-фононного взаимодействия не являются точными или, по крайней мере, однозначными.

Нами были измерены температурные зависимости частот всех наблюдаемых КР активных колебаний в кристаллах MnBi_2Te_4 , что позволило определить параметры ангармонизма различных мод, которые собраны в табл. 1. Видно, что относительные изменения частот всех колебаний при изменении температуры от гелиевой до комнатной $|\Delta\omega|/\omega$ очень близки друг к другу, за исключением фонона $A_{1g}^{(1)}$, где эта величина несколько меньше. Кроме того, нужно заметить, что относительное изменение частоты фонона $A_{1g}^{(2)}$ было определено с большой ошибкой, поскольку этот фонон проявляется в спектрах КР лишь как плечо самого сильного колебания в спектрах КР $E_g^{(3)}$ (см. рис. 4).

Мерой ангармонизма фононов являются также параметры Грюнайзена в кристаллах. Величины модовых параметров Грюнайзена для различных колебаний γ_i , вычисленных как $\gamma_i = (B/\omega_i) \cdot (d\omega_i/dp)$, представлены в табл. 1. Здесь $B = 51 \text{ ГПа}$ – объемный модуль упругости и $d\omega_i/dp$ определены из данных работы [13].

Для проверки правильности отнесения наблюдаемых мод КР нами были выполнены измерения спек-

Таблица 1. Ангармонические параметры кристаллов MnBi_2Te_4

Мода	ω (5 K), см^{-1}	$d\omega/dp$, [13] $\text{см}^{-1}/\text{ГПа}$	γ_i	$10^3 \cdot \Delta\omega /\omega$ $\Delta T = 290 \text{ K}$
$E_g^{(1)}$	28.1	–	–	41 ± 5
$A_{1g}^{(1)}$	48.3	1.44	1.52	31 ± 2
$E_g^{(2)}$	69.8	–	–	36 ± 3
$E_g^{(3)}$	107.9	1.63	0.77	37 ± 3
$A_{1g}^{(2)}$	~ 118	–	–	38 ± 8
$A_{1g}^{(3)}$	144.6	1.94	0.68	39 ± 5

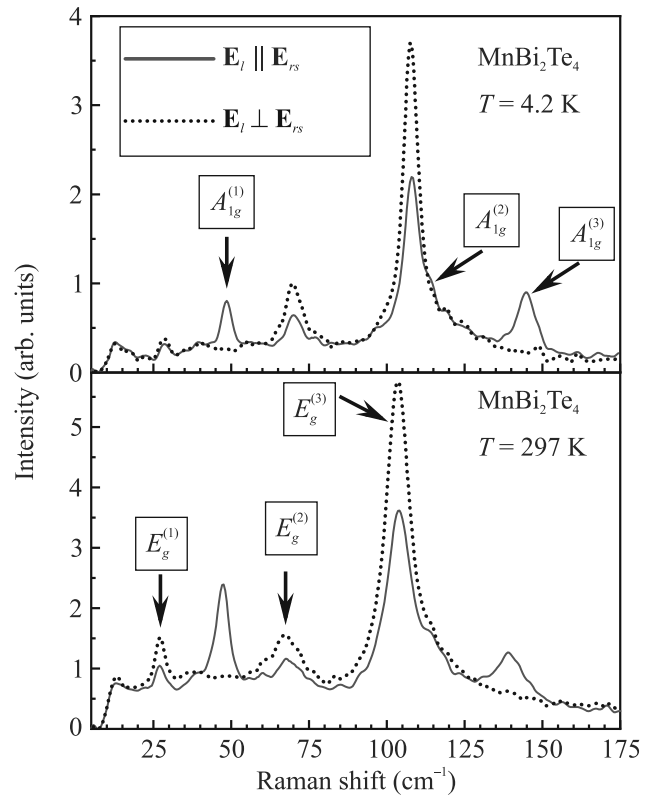


Рис. 4. (Цветной онлайн) Поляризованные спектры КР кристаллов MnBi_2Te_4 при двух температурах. Сплошные кривые измерены при направлении поляризации возбуждающего лазера $\mathbf{E}_l$ в плоскости поверхности образца, параллельном направлению поляризации рассеянного света $\mathbf{E}_{rs}$, точечные кривые при $\mathbf{E}_l$, перпендикулярном $\mathbf{E}_{rs}$. Стрелками указаны 6 КР активных колебаний

тров КР при различных линейных поляризациях возбуждающего лазера $\mathbf{E}_l$ и рассеянного света $\mathbf{E}_{rs}$. Парамагнитные объемные кристаллы MnBi_2Te_4 принадлежат к пространственной группе $R\bar{3}m$, с точечной группой симметрии D_{3d} в Γ точке зоны Бриллюэна. В них наблюдаются 6 активных в КР мод, $3A_{1g}$ симметрии и 3 двукратно вырожденных колебания

E_g симметрии [8, 9, 14]. Измерения поляризованных спектров КР могут быть использованы для идентификации этих мод различной симметрии, поскольку они обладают различными правилами отбора. В частности, моды E_g имеют отличные от нуля диагональные и недиагональные компоненты тензора КР света и, таким образом, видны как при параллельной, так и при скрещенной поляризации $\mathbf{E}_l$ и $\mathbf{E}_{rs}$. Моды же A_{1g} симметрии видны только при параллельной конфигурации, когда $\mathbf{E}_l \parallel \mathbf{E}_{rs}$. На рисунке 4 видно, что при $\mathbf{E}_l \perp \mathbf{E}_{rs}$ моды A_{1g} симметрии исчезают из спектров КР. Поскольку тензор КР света в MnBi_2Te_4 в магнитоупорядоченной фазе остается таким же, как и в немагнитной [15], такая же картина наблюдается и при низкой температуре (верхняя панель на рис. 4).

Монокристаллы MnSb_2Te_4 являются полным кристаллическим аналогом MnBi_2Te_4 . В них также должно наблюдаться 6 активных в КР света мод колебаний ($3E_g$ и $3A_{1g}$ симметрии). Согласно нашим расчетам, подобным проведенным ранее для MnBi_2Te_4 [10], частоты КР-активных колебаний в MnSb_2Te_4 составляют 29, 94, 123 см^{-1} и 52, 136, 167 см^{-1} для E_g и A_{1g} мод, соответственно. Однако до сих пор не существует надежных наблюдений всех шести мод, и, тем более, их отнесения по симметрии. На рисунке 5 представлены поляризованные спектры КР света кристаллов MnSb_2Te_4 при двух температурах – низкой и комнатной и при различных относительных поляризациях возбуждающего $\mathbf{E}_l$ и рассеянного света $\mathbf{E}_{rs}$. Видно, что при комнатной температуре можно выделить до четырех различных полос колебаний с частотами ~ 90 , 119, 139 и 264 см^{-1} . Сравнивая эти частоты с рассчитанными, можно было бы отнести моды с частотами 90 и 119 см^{-1} к колебаниям E_g симметрии, а моду с частотой 139 см^{-1} к колебанию A_{1g} симметрии. В то же время, частота самой высокочастотной моды $\sim 264 \text{ см}^{-1}$ находится далеко за пределами верхней границы возможных частот для колебательных мод в MnSb_2Te_4 , как это ясно видно из рассчитанной плотности фоновых состояний, спроектированной на каждый атом, которая приведена на рис. 6.

Более того, как видно из рис. 5, интенсивности всех наблюдаемых полос практически не зависят от взаимной ориентации поляризации $\mathbf{E}_l$ и $\mathbf{E}_{rs}$. Аналогичная картина наблюдается и при низкой температуре (верхняя панель на рис. 5).

Сравнение поляризованных спектров КР, представленных на рис. 4 и 5, однозначно указывает на то, что симметрия кристаллов MnSb_2Te_4 оказывается нарушенной. Это может быть связано с тем [11], что

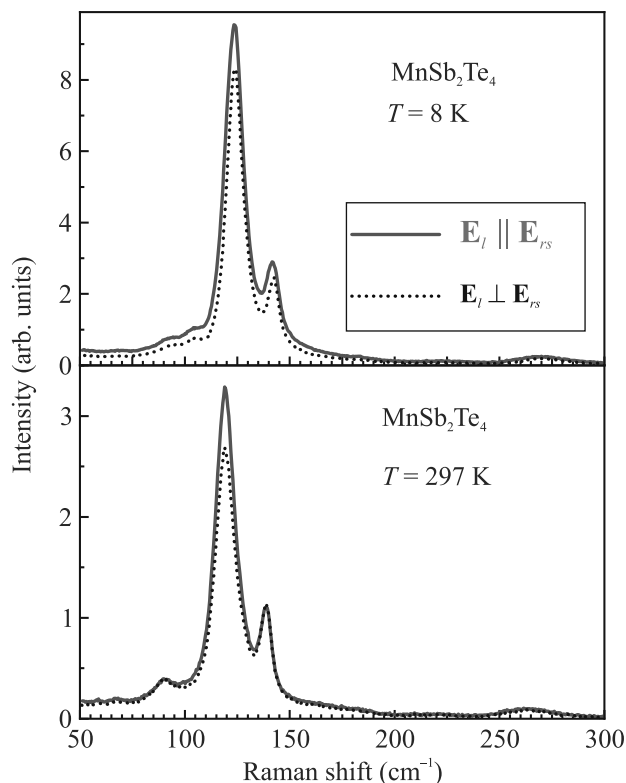


Рис. 5. (Цветной онлайн) Поляризованные спектры КР кристаллов MnSb_2Te_4 при двух температурах. Сплошные кривые измерены при направлении поляризации возбуждающего лазера $\mathbf{E}_l$ в плоскости поверхности образца, параллельном направлению поляризации рассеянного света $\mathbf{E}_{rs}$, точечные кривые при $\mathbf{E}_l$ перпендикулярном $\mathbf{E}_{rs}$

в кристаллах MnSb_2Te_4 , в отличие от изоструктурных кристаллов MnBi_2Te_4 , происходит значительное перемешивание атомов Sb и Mn, что и может объяснить наблюдаемые свойства поляризованных спектров КР, представленных на рис. 5.

Таким образом, в настоящей работе подробные исследования спектров КР света в кристаллах магнитных топологических изоляторов MnBi_2Te_4 в широком интервале температур от 4.2 до 300 K позволили определить ангармонические параметры различных фоновых мод. Было установлено, что, в отличие от опубликованных ранее результатов [8, 9], с точностью до $\pm 0.1 \text{ см}^{-1}$ температурная зависимость частоты $A_{1g}^{(1)}$ фонона с частотой $\sim 48 \text{ см}^{-1}$ в MnBi_2Te_4 может быть описана стандартной ангармонической моделью с помощью формулы (1), в которой не учитывается спин-фононное взаимодействие. Показано также, что спектры КР в кристаллах MnSb_2Te_4 , записанные при различных относительных поляризациях возбуждающего лазера $\mathbf{E}_l$ и

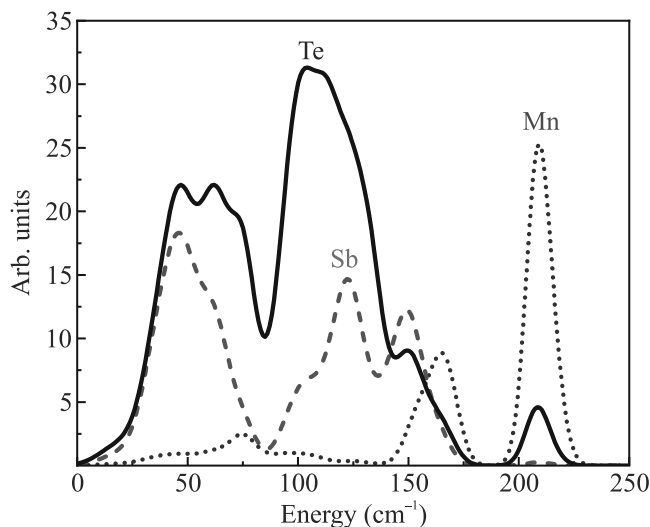


Рис. 6. (Цветной онлайн) Спроектированная на каждый атом плотность состояний, полученная в рамках рассчитанной фононной зонной структуры MnSb_2Te_4 . Сплошная кривая – Te, пунктирная – Sb и точечная – Mn

рассеянного света $\mathbf{E}_{rs}$, свидетельствуют в пользу того, что в этих кристаллах имеет место значительное перемешивание атомов подрешеток сурьмы и марганца.

1. D. N. Basov, R. D. Averitt, D. van der Marel, M. Dressel, and K. Haule, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 471 (2011).
2. S.-W. Cheong and M. Mostovoy, *Nat. Mater.* **6**, 13 (2007).
3. Y. Tokura, K. Yasuda, and A. Tsukazaki, *Nat. Rev. Phys.* **1**, 126 (2019).

4. M. M. Otrokov, I. I. Klimovskikh, H. Bentmann et al. (Collaboration), *Nature* **576**, 416 (2019).
5. S. Wimmer, J. Sánchez-Barriga, P. Küppers et al. (Collaboration), *Adv. Mater.* **33**, 2102935 (2021).
6. C. Z. Chang, J. Zhang, X. Feng et al. (Collaboration), *Science* **340**, 167 (2013).
7. I. Lee, Ch. K. Kim, J. Lee, S. J. L. Billinge, R. Zhong, J. A. Schneeloch, T. Liu, T. Valla, J. M. Tranquada, G. Gu, and J. C. S. Davis, *PNAS* **112**, 1316 (2015).
8. H. Padmanabhan, M. Poore, P. K. Kim et al. (Collaboration), *Nat. Commun.* **13**, 1929 (2022).
9. J. Choe, D. Lujan, M. Rodriguez-Vega, Z. Ye, A. Leonardo, J. Quan, T. N. Nunley, L.-J. Chang, S.-F. Lee, J. Yan, G. A. Fiete, R. He, and X. Li, *Nano Lett.* **21**, 6139 (2021).
10. Z. S. Aliev, I. R. Amirasanov, D. I. Nasonova, A. V. Shevelkov, N. A. Abdullayev, Z. A. Jahangirli, E. N. Orujlu, M. M. Otrokov, N. T. Mamedov, M. B. Babanly, and E. V. Chulkov, *J. Alloys Compd.* **789**, 443 (2019).
11. H. Li, Y. Li, Y. Lian, W. Xie, L. Chen, J. Zhang, Y. Wu, and S. Fan, *Sci. China Mater.* **65**(2), 477 (2022).
12. M. Balkanski, R. F. Wallis, and E. Haro, *Phys. Rev. B* **28**, 1928 (1983).
13. C. Pei, Y. Xia, J. Wu, Y. Zhao, L. Gao, T. Ying, B. Gao, N. Li, W. Yang, D. Zhang, H. Gou, Y. Chen, H. Hosono, G. Li, and Y. Qi, *Chin. Phys. Lett.* **37**, 066401 (2020).
14. Н. А. Абдуллаев, И. Р. Амирасланов, З. С. Алиев, З. А. Джахангирли, И. Ю. Складнева, Е. Г. Ализаде, Е. Н. Алиева, М. М. Отроков, В. Н. Зверев, Н. Т. Мамедов, Е. В. Чулков, *Письма в ЖЭТФ* **115**, 801 (2022).
15. A. P. Cracknell, *Journal of Physics C: Solid State Physics* **2**, 500 (1969).

Meta-bolometer based on toroidal response

M. Cojocari⁺, A. Merenkov⁺, F. Kovalev⁺, S. Shitov^{+,}, A. Basharin^{+,1)}*

⁺*National University of Science and Technology MISiS, 119049 Moscow, Russia*

^{*}*V. A. Kotel'nikov Institute of Radio Engineering and Electronics, Russian Academy of Sciences, 125009 Moscow, Russia*

Submitted 1 June 2023
Resubmitted 27 July 2023
Accepted 27 July 2023

DOI: 10.31857/S123456782317010X, EDN: kappig

In this letter, we propose a meta-bolometer based on high Q -factor microwave toroidal metamaterial with integrated absorbing superconducting pad. The resistance of superconducting elements can be varied by absorption of terahertz (THz) radiation (heating), which drastically changes the metamaterial microwave response. We study numerically the dependence of metamaterial resonance characteristics over the resistance (R) of the absorber pad. To explain the nonlinear spectral feature, we perform multipole expansion of the response at the resonance frequency for different values of R . We also estimate theoretically how characteristics of the resonance change over the pad temperature in the case of the square-shaped absorber made from a superconducting hafnium film.

Metamaterials are artificial periodic structures with exceptional properties, unachievable in conventional electronic materials. Metamaterials with easy-to-engineer properties have been of significant use in the development of bolometers. Metamaterials are usually integrated into bolometers as absorbers [1, 2]. As a result, one can broaden [3], narrow [4] or move the bandwidth, increase sensitivity, and control the speed of operation [5]. Toroidal metamaterials stand out by extremely high- Q resonances. Their radiation losses are suppressed, and fields in the metamolecules origin are extremely high and sensitive to the additional losses. In this letter, we introduce a novel concept of meta-bolometer. It is based on the combination of a microwave high- Q factor toroidal metamaterial as readout device with embedded micro-pad superconductor as an absorber of THz radiation. We establish that a pad with 20 kOhm/sq sheet resistance reduces metamaterial Q -factor and changes the stop-band level by as much as -50 dB at 1.5 GHz. Importantly, this sensitivity to the additional losses requires no galvanic connection to the absorber. This allows one to detect THz heating of

superconducting pad via the change in metamaterial transmission spectrum.

The metamaterial we choose to play the role of the high Q -factor resonator is anapole metamaterial proposed by Basharin et al. [6]. Among the properties of chosen metamaterial, we highlight the negligible impact of the losses in real conductors on the metamaterial Q -factor: just two orders of magnitude less [6]. The array of metamolecules was simulated with periodic boundary conditions. Each of the periodically arranged metamolecules consists of two mirrored epsilon letters as shown in the inset in Fig. 1. In the simulation, an in-

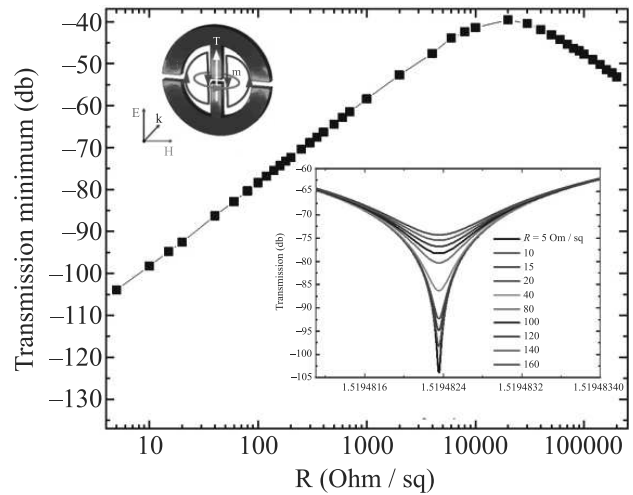


Fig. 1. (Color online) Dependence of the transmission minimum over resistance of the inserted absorber. In the insets – metamaterial model and simulated transmission spectra for different resistance of the insertion

cident microwave radiation, polarized along the central wires, penetrates the single PEC metamolecule accounting for the periodic boundary conditions of their array. It excites two counter-directed currents in the metamolecule voids, which results in magnetic fields vectors being rotated around the central strips. Such field con-

¹⁾e-mail: alexey.basharin@gmail.com

figuration resembles a torus cross-section, which enables excitation of the toroidal dipole moment along with the electric dipole moment.

We consider the absorber as a superconducting hafnium film because of its nonlinear response at 1.5 GHz below $T_c = 400$ mK. Respectively, we estimate the losses in hafnium over temperature at the metamaterial resonant frequency using Mattis–Bardeen theory. This approach can significantly improve the future design of the terahertz/millimeter-wave detectors. We incorporate an absorbing (Hf) pad between the central strips, 1.85 mm away from each. We study, then, how the metamaterial resonance changes with the increasing resistance of the pad.

The role of the absorber plays a 0.5×0.5 mm pad with variable surface resistance. Physically, this means that bolometer based on our metamaterial is illuminated with two electromagnetic waves at the same time. The wide microwave beam is the plane wave at the resonance frequency of the metamaterial. The second beam is THz radiation which is absorbed by a lossy element (Hf pad) in the center of each metamolecule.

While simulating nonlinear Hf absorber, we consider the model of its high-frequency-induced transition from superconducting to the normal state. We plot its resonance minimum over the surface resistance of the pad in Fig. 1. The actual transmission spectra for small resistance varying from $R = 5$ Ohm/sq to $R = 160$ Ohm/sq are presented in the inset in Fig. 1.

In conclusion, we proposed a model of a superconducting meta-bolometer. We demonstrated that toroidal metamaterials are very promising candidates for bolometers applications due to strongly localized electric fields and extremely high Q -factor transmission spectra. This allows toroidal metamaterials to detect the slightest change of incorporated absorbers resistance. The proposed bolometer is based on the superconducting transition. To show this, we used Mattis–Bardeen theory to evaluate the dependence of the metamaterial resonance characteristics over the temperature of Hf pad. In the practical implementation, a focused THz beam would heat the absorber, while a plane GHz wave would be used for reading the absorber’s temperature

at the resonant frequency of the toroidal metamaterial. The depth of the resonance on the transmission spectrum of the GHz wave would reveal the temperature of the pad, and, correspondingly, the frequency of the detected THz radiation. Practical realization of the proposed bolometer has potential applications in astronomy as detectors of extremely low THz signal levels available from the Cosmic Microwave Background Radiation [7, 8] and other objects of the Deep Space [9].

We acknowledge support from the Ministry of Education and Science of the Russian Federation in the framework of the Program of Strategic Academic Leadership “Priority 2030” (Strategic Project “Quantum Internet”).

This is an excerpt of the article “Meta-Bolometer based on toroidal response”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364023601732

1. J. Grant, I. Escorcia-Carranza, C. Li, I. J. H. McCrindle, J. Gough, and D. R. S. Cumming, *Laser Photonics Rev.* **7**, 1043 (2013).
2. V. Savinov, V. A. Fedotov, P. A. de Groot, and N. I. Zheludev, *Supercond. Sci. Technol.* **26**, 084001 (2013).
3. A. Noor and Z. Hu, *J. Infrared Millim. Terahertz Waves* **31**, 791 (2010).
4. A. Strikwerda, H. Tao, E. A. Kadlec, K. Fan, W. J. Padilla, X. Zhang, E. A. Shaner, and R. D. Averitt, *Metamaterial based terahertz detector*, in *CLEO:2011 – Laser Applications to Photonic Applications*, Optica Publishing Group (2011), pp. QTuD6.
5. F. Alves, L. Pimental, D. Grbovic, and G. Karunasiri, *Sci. Rep.* **8**, 12466 (2018).
6. A. A. Basharin, V. Chuguevsky, N. Volsky, M. Kafesaki, and E. N. Economou, *Phys. Rev. B* **95**, 035104 (2017).
7. *Handbook of terahertz technologies: devices and applications*, ed. by H.-J. Song and T. Nagatsuma, Pan Stanford Publishing, Singapore (2015).
8. W. S. Holland, D. Bintley, E. L. Chapin, A. Chrysosotomou, G. R. Davis, J. T. Dempsey, W. D. Duncan, M. Fich, P. Friberg, M. Halpern, and K. D. Irwin, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **430**, 2513 (2013).
9. R. A. Lewis, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **52**, 433001 (2019).

Туннельный механизм изменения направления движения пульсирующего рэтчета. Влияние температуры

В. М. Розенбаум^{+*1)}, И. В. Шапочкина^{+*}, Л. И. Трахтенберг^{×°}

⁺Белорусский государственный университет, 220050 Минск, Беларусь

^{*}Dalian University of Technology and Belarusian State University Joint Institute, Dalian University of Technology, 116024 Dalian, People's Republic of China

[×]Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семенова РАН, 119991 Москва, Россия

[°]Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 18 июля 2023 г.

После переработки 26 июля 2023 г.

Принята к публикации 30 июля 2023 г.

Рассматривается пульсирующий рэтчет с пространственно периодическим двухъямным потенциальным профилем, флуктуирующим на полпериода. Направление движения в таком рэтчете определяется тем, преодоление какого из барьеров, окружающих мелкую потенциальную яму, имеет большую вероятность. При относительно высоких температурах, в соответствии с законом Аррениуса, вероятности преодоления барьеров определяются их высотами, а при температурах, близких к абсолютному нулю, когда движение рэтчета происходит по туннельному механизму, важна также и форма барьера. Поэтому для узкого высокого и низкого широкого барьеров механизм преодоления может оказаться различным и, кроме того, зависящим от температуры. В результате возможно температурно-индуцированное изменение направления движения рэтчета. Представлена простая интерполяционная теория, иллюстрирующая этот эффект. Сформулированы простые критерии к форме потенциального рельефа, используя которые можно экспериментально наблюдать обращение движения.

DOI: 10.31857/S1234567823170111, EDN: kbmmmin

Среди разнообразных свойств наноразмерных систем, в которых направленное движение наночастиц возникает за счет рэтчет-эффекта, одно из впечатляющих – возможность управления направлением этого движения путем изменения какого-либо параметра системы, например, температуры окружения или частоты внутренних или внешних флуктуаций [1–4] (см. также обзор [5] и литературу, цитируемую в нем). Механизмы формирования направленного движения за счет неравновесных флуктуаций и асимметрии периодического потенциального профиля наночастицы существенно отличаются для двух основных классов рэтчетов, называемых рэтчетами с флуктуирующей силой (*rocking ratchet*) и рэтчетами с флуктуирующим (пульсирующим) периодическим профилем потенциальной энергии или просто пульсирующими рэтчетами (*pulsating* или *flashing ratchet*) [2, 3]. В первом из них неравновесные флуктуации потенциальной энергии наночастицы обусловлены воздействием внешней переменной (флуктуирующей) силы с нулевым средним значением, а во втором –

флуктуациями внутренних параметров самого этого потенциального профиля. Различные методы введения флуктуаций в систему приводят и к различным зависимостям потока частиц (средней скорости рэтчета) от коэффициентов пространственной и временной асимметрии потенциальной энергии наночастиц [6], а также к различному характеру его зависимости от частоты флуктуаций [7, 8]. Наиболее изучен первый класс рэтчетов, для которых преимущественно открывались новые свойства [3, 9].

Как известно [5], рэтчеты, принадлежащие первому классу, легче реализовать экспериментально, например, путем использования в качестве управляющих флуктуаций внешнего электромагнитного поля. Поэтому возможность регуляции движения за счет организации конкуренции пространственной и временной асимметрии потенциальной энергии была первой продемонстрирована для рэтчетов с флуктуирующей силой [10, 11] и лишь спустя почти 10 лет – для пульсирующих рэтчетов [12, 13]. Учет квантовых эффектов в механизмах функционирования микроскопических рэтчетов идет, очевидно, в той же последовательности.

¹⁾e-mail: vik-roz@mail.ru

В пионерской работе [1] было показано, что рэтчет с флуктуирующей силой, характеризующийся при достаточно высоких температурах, некоторым направлением движения, может изменить это направление на противоположное при низких температурах, когда туннельный механизм движения превалирует над классическим. Этот теоретический результат был подтвержден экспериментально [14] (подробнее см. [15]). Для пульсирующих рэтчетов эффект изменения направления движения не был известен.

В данной работе показана возможность обращения движения благодаря туннельному эффекту для пульсирующих рэтчетов. Модель высокоэффективного броуновского мотора с периодическим двухъямным потенциальным профилем, флуктуирующим на полпериода [16, 17], взята в качестве базовой модели и расширена учетом туннелирования. Направление движения в таком рэтчете определяется тем, для какого из барьеров, окружающих мелкую потенциальную яму, вероятность его преодоления больше.

На рисунке 1 мелкая потенциальная яма ограничена слева высоким и узким барьером, а справа – низким и широким. При высоких температурах вероятность преодоления барьера, согласно закону Аррениуса, определяются только его высотой. Поэтому правый барьер преодолевается легче, и частица с большей вероятностью окажется в правой глубокой потенциальной яме. Дихотомные флуктуации потенциального профиля $V(x)$ на половину пространственного периода $L/2$ означают, что если в одном из состояний дихотомного процесса потенциальный рельеф описывается функцией $V(x)$, то в другом дихотомном состоянии он будет сдвинут на $L/2$ с полным сохранением формы и описываться функцией $V(x \pm L/2)$. Вследствие таких флуктуаций частица, находящаяся в глубокой яме к концу времени жизни данного профиля, перебрасывается вертикально в мелкую яму сдвинутого профиля. После этого процесс повторяется в сдвинутом профиле. За счет энергии, приобретаемой частицей при сдвигах потенциальных профилей, возникает среднее направленное движение направо (см. красные стрелки направо на рис. 1), являющееся сутью рэтчет-эффекта.

При температурах в области абсолютного нуля термоактивационное движение рэтчета замораживается и начинает доминировать туннелирование, для которого становится важной как высота потенциальных барьеров, так и их ширина. При должном подборе параметров потенциального профиля вероятность туннелирования через узкий высокий барьер окажется больше, чем через широкий низкий. Поэтому опи-

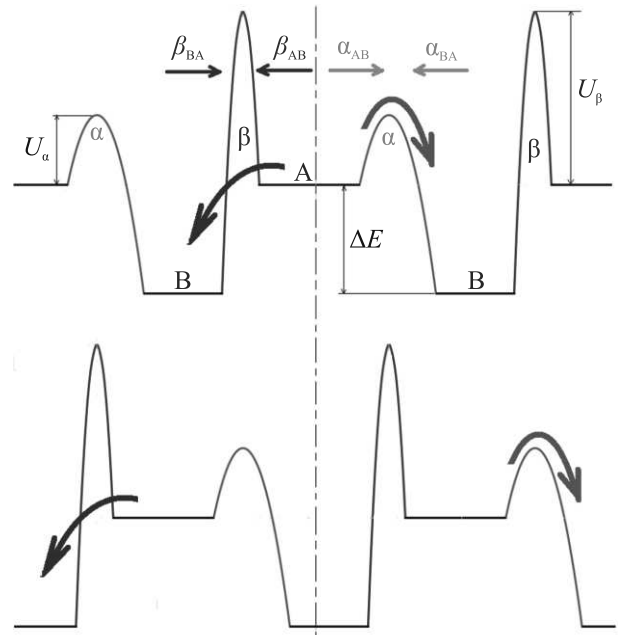


Рис. 1. (Цветной онлайн) Двухъямные потенциальные профили пульсирующего рэтчета, сдвигающиеся на полпериода (верхний и нижний профили). Мелкая и глубокая потенциальные ямы обозначены через A и B. Широкий низкий и узкий высокий барьеры обозначены через α и β . Константы скоростей переходов через барьеры обозначены соответствующими символами барьеров и индексами ям, последовательность которых указывает направление перехода. Стрелки направо и налево (красные и синие) указывают направления движения рэтчета, функционирующего за счет процессов термоактивации или туннелирования

санный выше процесс функционирования пульсирующего рэтчета реализуется и при низких температурах, вплоть до абсолютного нуля, с тем принципиальным отличием, что направление движения обращается с понижением температуры (см. синие стрелки налево на рис. 1).

Описанный туннельный механизм обращения движения пульсирующего рэтчета не был известен ранее и составляет основное содержание данной статьи. Он отличается от приведенного в работе [1] для рэтчета с флуктуирующей силой тем, что малая флуктуирующая сила сама приводила к нужным искажениям формы единственного барьера на периоде, тогда как для обращения движения пульсирующего рэтчета требуется хотя бы два барьера на периоде с определенным соотношением их высот и ширин. Далее мы приводим количественный анализ обсуждаемого эффекта на основе строгого результата кинетического описания рэтчета пульсирующего типа [17, 18], в котором фигурируют

константы скоростей преодоления потенциальных барьеров. Для высоких и предельно низких температур эти константы могут быть представлены простыми аналитическими соотношениями (законом Аррениуса и формулой Гамова, соответственно [19, 20]), позволяющими выявить условия, при которых эффект обращения движения имеет место. В области промежуточных температур представлено простое интерполяционное описание, использующее температуру, разделяющую области доминирования термоактивационного и туннельного механизмов преодоления потенциальных барьеров (*crossover temperature*) [21–23]. Цель такого упрощенного описания в области промежуточных температур состоит в том, чтобы дать читателю понимание ключевых особенностей температурной зависимости средней скорости рэтчета (включая обращение движения). Строгое описание температурной зависимости констант скоростей переходов [24] выходит за рамки данной статьи, ставящей целью показать только возможность эффекта обращения движения для пульсирующих рэтчетов.

Аналитические решения уравнения Смолуховского, описывающие характеристики классического сверхзатухающего пульсирующего рэтчета с периодическим асимметричным потенциальным профилем, сдвигающимся на полпериода, получены в работе [16]. При относительно высоких температурах, соответствующих тепловой энергии, не превышающей энергетических барьеров, движение броуновской частицы можно рассматривать как прыжковое и воспользоваться кинетическим описанием. Такое описание для рассматриваемого рэтчета проводилось в работе [17] для стохастического дихотомного процесса флуктуаций (сдвигов) потенциального профиля, а в работе [18] и для детерминистических флуктуаций (детерминистического дихотомного процесса), при которых каждый профиль характеризовался заданным временем жизни τ_+ и τ_- . Для стохастического дихотомного процесса эти времена заменяются средними частотами переходов между профилями $\langle\tau_+^{-1}\rangle$ и $\langle\tau_-^{-1}\rangle$, сумма которых задает важную характеристику флуктуаций – обратное время корреляции Γ . В случае симметричного дихотомного процесса $\tau_+ = \tau_-$ величина Γ связана с его периодом (средним периодом) соотношением $\Gamma = 4/\tau$.

В рамках кинетического подхода дихотомные сдвиги двухъямного потенциального профиля на полпериода описываются антисимметричной моделью [18]. Эта модель характеризуется заданными константами скоростей переходов α_{AB} , α_{BA} и β_{BA} , β_{AB} через каждый потенциальный барьер α и β в

обоих направлениях (рис. 1), а также равными значениями τ_+ и τ_- . В отсутствие силы нагрузки, которую обычно рассматривают при вычислении энергетических характеристик рэтчетов, для констант скоростей, соответствующих обратным переходам, справедливо соотношение детального баланса [25]

$$\alpha_{BA} = \alpha_{AB} e^{-\Delta E/k_B T}, \quad \beta_{BA} = \beta_{AB} e^{-\Delta E/k_B T}, \quad (1)$$

где k_B – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура, а ΔE – разность энергий нулевых колебаний в потенциальных ямах А и В, приближенно равная разности минимумов энергий этих ям, если они имеют близкую кривизну. Использование соотношений (1) существенно упрощает общие выражения, полученные в работе [18], и позволяет прийти к простому результату для потока частиц J (средняя скорость рэтчета $\langle v \rangle$ связана с потоком соотношением $\langle v \rangle = J L$, где L – пространственный период потенциального профиля):

$$J = \frac{1}{4} \Gamma \varphi(\Gamma) \frac{\alpha_{AB} - \beta_{AB}}{\alpha_{AB} + \beta_{AB}} \tanh(\Delta E/2k_B T). \quad (2)$$

Здесь функция $\varphi(\Gamma)$ обратного времени корреляции Γ определяется следующими выражениями для детерминистического и стохастического дихотомного процесса:

$$\varphi(\Gamma) = \begin{cases} \tanh(\Sigma/\Gamma), & \text{deterministic,} \\ \Sigma(\Sigma + \Gamma)^{-1}, & \text{stochastic,} \end{cases} \quad (3)$$

$$\Sigma = (\alpha_{AB} + \beta_{AB})(1 + e^{-\Delta E/k_B T}).$$

Выражение (2) допускает наглядную физическую интерпретацию. При $\Delta E > 0$ (т.е. когда барьеры β и α окружают мелкую потенциальную яму соответственно слева и справа, как показано на рис. 1) знак потока J определяется знаком разности $\alpha_{AB} - \beta_{AB}$. Это означает, что направление движения рэтчета происходит в направлении от менее глубокой ямы к тому соседнему барьеру, вероятность преодоления которого больше. В случае одинаковых барьеров α и β ($\alpha_{AB} = \beta_{AB}$) или одинаковых потенциальных ям А и В ($\Delta E = 0$) рэтчет эффект отсутствует, так как рассматриваемый потенциальный профиль описывается симметричной периодической функцией [26]. Сопоставление ям и барьеров исходного потенциального профиля и сдвинутого на полпериода (рис. 1) приводит к важному наблюдению: направленное движение возникает только при одновременных флуктуациях параметров потенциальных барьеров и ям этого пульсирующего рэтчета [27, 28].

Явный вид выражений для констант скоростей переходов α_{AB} и β_{AB} через правый и левый барьеры определяется типом учитываемых процессов. Для

оптимизации представления однотипных выражений для барьеров α и β введем обозначение γ для константы скорости преодоления произвольного барьера и представим температурную зависимость этой константы в виде:

$$\gamma(T) = k_0 e^{-S_\gamma(T)}, \quad \gamma = \alpha, \beta. \quad (4)$$

Здесь предэкспоненциальный множитель k_0 , имеющий смысл частоты соударений частицы с потенциальным барьером, можно, с экспоненциальной точностью, считать не зависящим от температуры, так что вся температурная зависимость заключена в показателе экспоненты – функции $S_\gamma(T)$.

При относительно высоких температурах справедлив закон Аррениуса, для которого $S_\gamma(T) = U_\gamma/k_B T$. При температурах, стремящихся к абсолютному нулю, функция $S_\gamma(0)$ должна следовать формуле Гамова

$$S_\gamma(0) = \frac{2}{\hbar} \int_a^b dx \sqrt{2m[U_\gamma(x) - E]}, \quad (5)$$

где $\hbar$ – постоянная Планка, m – масса частицы, E – ее энергия, задающая границы потенциального барьера a и b . Критерий температуры для границы, разделяющей температурную область, в которой туннельные переходы преобладают над аррениусовскими, для параболического барьера имеет вид [21–23]:

$$T_\gamma^* = \hbar \Omega_\gamma (2\pi k_B)^{-1}, \quad \Omega_\gamma \equiv \sqrt{|U_\gamma''(x_{\max})|/m}, \quad (6)$$

где $x_{\max}$ – координата максимума барьера. Учет диссипации, характеризуемой коэффициентом трения ζ , приводит к замене в выражении (6) “барьерной” частоты Ω_γ фактором [1, 19]

$$\mu = \frac{\sqrt{\zeta^2 + 4m|U_\gamma''(x_{\max})|} - \zeta}{2m}, \quad (7)$$

стремящимся к $|U_\gamma''(x_{\max})|/\zeta$ при $m|U_\gamma''(x_{\max})| \ll \zeta^2$.

Таким образом, в широкой области температур, удовлетворяющей неравенствам $T_\gamma^* \ll T < U_\gamma/k_B$, справедлив закон Аррениуса и знак потока J определяется знаком разности высот барьеров, окружающих мелкую потенциальную яму:

$$\text{sign } J = \text{sign}(U_\beta - U_\alpha). \quad (8)$$

Поскольку в области предельно низких температур $T \ll T_\gamma^*$ можно использовать формулу Гамова (5), то в этой области

$$\text{sign } J = \text{sign}(U_\beta/T_\beta^* - U_\alpha/T_\alpha^*). \quad (9)$$

Если ввести параметр ширины потенциального барьера Δx_γ , то величину $S_\gamma(0)$ можно записать как

$S_\gamma(0) = \kappa \hbar^{-1} \Delta x_\gamma \sqrt{2mU_\gamma}$, где κ – числовой множитель, зависящий от формы барьера. Так, для прямоугольного барьера κ равно 2, для параболического $\kappa = \pi/2$ и $S_\gamma(0) = U_\gamma/k_B T_\gamma^*$, а для треугольного $\kappa = 4/3$. Тогда соотношение (9) можно представить в виде $\text{sign } J = \text{sign}(\Delta x_\beta \sqrt{U_\beta} - \Delta x_\alpha \sqrt{U_\alpha})$, справедливым для барьеров разной формы.

Сопоставляя уравнения (8) и (9), приходим к выводу, что условия обращения движения при переходе от термоактивационного к туннельному механизму преодоления барьеров в пульсирующем рэтчете с потенциалом, флуктуирующем на полпериода, можно представить в следующих двух эквивалентных формах:

$$\left(\frac{\Delta x_\beta}{\Delta x_\alpha}\right)^2 < \frac{U_\alpha}{U_\beta} < 1, \quad \frac{T_\alpha^*}{T_\beta^*} < \frac{U_\alpha}{U_\beta} < 1. \quad (10)$$

Эти условия как раз и означают, что обращение движения происходит, когда меньшее единицы отношение высот барьеров, окружающих мелкую потенциальную яму, будет превышать отношение соответствующих граничных температур (6) или квадрат обратного отношения ширин этих барьеров.

Рассмотрим температурную зависимость потока (2) при термоактивационном механизме преодоления потенциальных барьеров. Использование аррениусовского закона для констант скоростей переходов дает зависимости потока от обратной температуры, представленные сплошными линиями в левой части графика и на вставке рис. 2. Немонотонность в области высоких температур обусловлена стохастическим резонансом, проявляющимся в нелинейных системах, когда отклик системы имеет резонансоподобное поведение в зависимости от уровня шума (температуры) [29].

Проявление стохастического резонанса в температурных зависимостях характеристик вращательных полярных рэтчет систем (для которых различия двух классов рэтчетов стираются) под действием переменного электрического поля подробно исследовалось в работе [28]. Характерной особенностью стохастического резонанса является увеличение температуры максимума отклика системы при увеличении частоты внешнего поля. В нашем случае такой частотой служит обратное время корреляции флуктуаций Γ . На вставке к рис. 2 кривая 2 соответствует значению Γ которое в 10 раз больше, чем значение Γ для кривой 1. При этом максимум обратной температурной зависимости потока сдвигается влево так, что температура максимума кривой 2 примерно в два раза больше аналогичной температуры кривой 1. Это

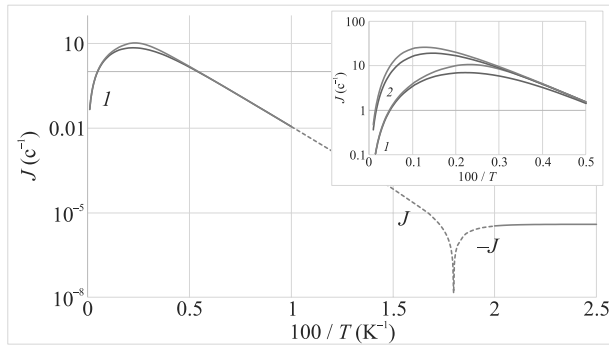


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость потока (логарифмическая шкала) от обратной температуры, рассчитанная по формуле (2). Сплошные линии в областях высоких и предельно низких температур соответствуют аррениусовским константам скоростей переходов и рассчитанным по формуле Гамова (5) для параболических барьеров. Верхние и нижние кривые в области максимумов (оранжевые и синие) соответствуют детерминистическим и стохастическим дихотомным флуктуациям. Пунктирной линией представлено схематическое поведение потока в области промежуточных температур, где происходит обращение движения. При расчетах использованы следующие значения параметров: $U_\alpha/k_B = 1000$ K, $T_\alpha^* = 50$ K, $U_\beta/k_B = 2500$ K, $T_\beta^* = 140$ K, $\Delta E/k_B = 500$ K, $k_0 = 1$ кГц, $\Gamma = 0.1$ кГц (кривая 1), $\Gamma = 1$ кГц (кривая 2)

говорит о том, что мы действительно имеем дело со стохастическим резонансом.

Только в узкой температурной области вблизи максимума стохастического резонанса наблюдается расщепление температурных зависимостей потока на кривые, описывающие детерминистические и стохастические дихотомные флуктуации сдвигов потенциального профиля на полпериода. В остальной области температур эти зависимости вырождены.

Такое поведение легко объясняется видом функции $\varphi(\Gamma)$ (3) для детерминистического и стохастического дихотомного процесса. При фиксированном значении Γ в области высоких температур $\Sigma \gg \Gamma$ функция $\varphi(\Gamma)$ для обоих процессов приблизительно равна 1 и поток пропорционален Γ . При низких температурах $\Sigma \ll \Gamma$ функция $\varphi(\Gamma)$ для обоих процессов приблизительно равна Σ/Γ и поток перестает зависеть от Γ . Поэтому пары кривых 1 и 2 на рис. 2 сливаются в области низких температур, сильно различаются в области высоких температур, поскольку соответствуют различным значениям частот Γ , а в узкой области стохастического резонанса $\Sigma \approx \Gamma$, где функции $\varphi(\Gamma)$ для стохастического и детерминистического процессов различаются, происходит снятие вырождения внутри каждой пары.

Отметим, что область применимости используемого в данной статье кинетического подхода не допускает рассмотрение частот флуктуаций Γ , превышающих характерные частоты внутриямного движения (предэкспоненциальный множитель k_0 в (4)). В области частот $\Gamma \gg k_0$ приближение прыжкового движения уже не допустимо, а строгое рассмотрение решений уравнения Смолуховского с непрерывными потенциалами дает исчезновение рэтчет эффекта при $\Gamma \rightarrow \infty$, как и должно быть [2] (наличие скачков потенциала допускает наличие рэтчет эффекта в сверхзатухающем режиме движения [16]). Тем не менее, при низких температурах, когда $\Sigma \ll \Gamma$, использование кинетического приближения вполне допустимо ввиду того, что вероятности преодоления барьеров $\exp[-S_\gamma(T)]$ экспоненциально малы. Поэтому $\Sigma \sim \gamma(T) \ll k_0$ и в области низких температур частота флуктуаций должна только попасть в следующий интервал $\Sigma \ll \Gamma \ll k_0$. Отметим также, что явление стохастического резонанса присуще и рэтчетам с флуктуирующей силой (*rocking ratchets*) [28]. Тем не менее, в работе [1], исследовавшей именно этот класс рэтчетов, стохастический резонанс не отмечался, поскольку рассматривался только адиабатический (низкочастотный) режим движения.

Сплошная линия на рис. 2 в области предельно низких температур соответствует отрицательному туннельному потоку рэтчета, рассчитанному по формуле (2) с константами скоростей переходов (4), в которых $S_\gamma(0) = U_\gamma/k_B T_\gamma^*$, где температура T_γ^* определялась формулой (6) для параболических барьеров. Значения параметров выбирались такими, чтобы удовлетворялось условие (10) обращения знака потока с изменением температуры.

Чтобы схематически описать характерное поведение температурной зависимости потока в той области, где он изменяет знак, мы воспользовались несколько грубым, но часто используемым представлением полных констант скоростей преодоления потенциальных барьеров как суммы аррениусовского и туннельного вкладов (см. формулу (9.1) и обсуждение простой квантовой теории переходного состояния в [19]). Причина употребимости такого представления состоит в том, что оно правильно воспроизводит значения констант скоростей переходов в областях высоких и низких температур: при высоких температурах за счет малости туннельного вклада по сравнению с аррениусовским, а во второй – за счет экспоненциально быстрого стремления последнего к нулю. Пунктирная линия на рис. 2 представляет результат такого описания. Обращение знака потока (возникновение точки остановки рэтчета) происхо-

дит при температуре $T \approx 56$ К, попадающей в интервал (T_α^*, T_β^*) и близкой к значению $T_\alpha^* = 50$ К.

Отметим, что для полного описания температурной зависимости потока в области изменения его знака и определения температуры, соответствующей точке останова рэтчета, надо учитывать, что константа скорости туннелирования частиц зависит от их массы, параметров преодолеваемого барьера, свойств среды и температуры. Известно несколько механизмов экспоненциальной зависимости константы скорости от температуры (4). Например, для переноса электрона в полярной среде температурная зависимость определяется энергией ее реорганизации, для туннелирования атомов и ионов основную роль играют межмолекулярные колебания, меняющие величину и форму потенциального барьера, а также реорганизация среды [23, 24, 30–34]. Заметную роль играет и диссипация энергии при туннелировании при нулевой и произвольной температурах [19, 35–39].

В данной статье для анализа температурной зависимости потока (включая исследование возможности его обращения) в высокоэффективном пульсирующем рэтчете с периодическим двухъямным потенциальным профилем, флуктуирующим на полпериода, предложена формула (2). Эта формула при соблюдении условия детального баланса (отсутствия сил нагрузки или градиентов концентрации) является упрощением результата, известного для антисимметричной модели рэтчета с дихотомным переключением двух состояний с двумя каналами реакций [18]. Ценность и привлекательность формулы (2) состоит в ее структуре, произведении нескольких сомножителей, каждый из которых отображает различные важные свойства рассматриваемого рэтчета.

В выражении для потока (2) зависящий от частоты флуктуаций Γ сомножитель $\Gamma\varphi(\Gamma)$, определенный формулой (3), во-первых, отличает пульсирующий рэтчет от рэтчета с флуктуирующей силой тем, что дает пропорциональность потока частоте Γ в адиабатическом режиме движения, во-вторых, демонстрирует наличие стохастического резонанса вне адиабатического режима движения, и, в-третьих, описывает отличие в потоках, индуцированных стохастическим дихотомным процессом и детерминистическим, которое возникает только в узкой области температур вблизи максимума стохастического резонанса.

Остальные сомножители в выражении (2) отражают симметрию рассматриваемой модели, а также содержат такие константы скоростей преодоления потенциальных барьеров, явный вид которых позволяет учитывать в описании как классический термо-

активационный, так и квантовый туннельный процессы. Асимметрия потенциального профиля обеспечивается разностью глубин потенциальных ям ΔE и константами скоростей α_{AB} и β_{AB} , так что знак потока определяется знаками величин ΔE и $(\alpha_{AB} - \beta_{AB})$. Для классического и квантового процессов имеем $\text{sign}(\alpha_{AB} - \beta_{AB}) = \text{sign}(U_\beta - U_\alpha)$ и $\text{sign}(\alpha_{AB} - \beta_{AB}) = \text{sign}(\Delta x_\beta \sqrt{U_\beta} - \Delta x_\alpha \sqrt{U_\alpha})$, соответственно, где U_γ и Δx_γ – высоты и ширины правого ($\gamma = \alpha$) и левого ($\gamma = \beta$) барьеров, окружающих мелкую потенциальную яму ($\Delta E > 0$). Поэтому при выполнении условий (10) реализуется обращение движения, схематически показанное на рис. 2 пунктирной линией.

Отметим, что в отличие от рэтчета с флуктуирующей силой, аналитическое описание туннелирования которого оказалось возможным только в адиабатическом (низкочастотном) режиме [1], проведенный в данной статье анализ обращения движения пульсирующего рэтчета свободен от данного ограничения. Он также выявил стохастический резонанс и различие его характеристик для детерминистических и стохастических флуктуаций потенциальных рельефов. Экспериментальное наблюдение обнаруженного обращения движения пульсирующих рэтчетов описанного типа требует создания периодического потенциального рельефа определенной асимметричной формы, флуктуирующего на полпериода. Источником такого рельефа, например, в органических пульсирующих электронных рэтчетах [40] могут быть пальчиковые электроды, изготовленные методом осаждения сфокусированного ионного пучка (*focused-ion-beam-assisted deposition*). При этом сдвиговые флуктуации рельефа на полпериода могут быть реализованы путем переключения потенциалов, подаваемых на эти электроды.

Работа была поддержана субсидией Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания # 122040500071-0 и Российским фондом фундаментальных исследований (Проект # 21-57-52006_MNT_a).

1. P. Reimann, M. Grifoni, and P. Hänggi, Phys. Rev. Lett. **79**, 10 (1997).
2. P. Reimann, Phys. Rep. **361**, 57 (2002).
3. P. Hänggi and F. Marchesoni, Rev. Mod. Phys. **81**, 387 (2009).
4. V. M. Rozenbaum, T. Ye. Korochkova, I. V. Shapochkina, and L. I. Trakhtenberg, Phys. Rev. E **104**, 014133 (2021).
5. Ю. В. Гуляев, А. С. Бугаев, В. М. Розенбаум, Л. И. Трахтенберг, Успехи физических наук

- 190, 337 (2020) [Yu. V. Gulyaev, A. S. Bugaev, V. M. Rozenbaum, and L. I. Trakhtenberg, *Phys.-Uspekhi* **63**, 311 (2020)].
6. V. M. Rozenbaum, I. V. Shapochkina, Y. Teranishi, and L. I. Trakhtenberg, *Phys. Rev. E* **100**, 022115 (2019).
7. R. D. Astumian and M. Bier, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 1766 (1994).
8. В. М. Розенбаум, И. В. Шапочкина, Л. И. Трахтенберг, *Успехи физических наук* **189**, 529 (2019) [V. M. Rozenbaum, I. V. Shapochkina, and L. I. Trakhtenberg, *Phys.-Uspekhi* **62**, 496 (2019)].
9. J. A. Fornes, *Principles of Brownian and Molecular Motors*, Springer, Cham (2021).
10. D. Dan, M. C. Mahato, and A. M. Jayannavar, *Phys. Rev. E* **63**, 056307 (2001).
11. B. Q. Ai, H. Z. Xie, and L. G. Liu, *Eur. Phys. J. B* **47**, 109 (2005).
12. В. М. Розенбаум, *ЖЭТФ* **137**, 740 (2010).
13. V. M. Rozenbaum, T. Ye. Korochkova, A. A. Chernova, and M. L. Dekhtyar, *Phys. Rev. E* **83**, 051120 (2011).
14. H. Linke, T. E. Humphrey, A. Löfgren, A. O. Sushkov, R. Newbury, R. P. Taylor, and P. Omling, *Science* **286**, 2314 (1999).
15. H. Linke, T. E. Humphrey, P. E. Lindelof, A. Lofgren, R. Newbury, P. Omling, A. O. Sushkov, R. P. Taylor, and H. Xu, *Appl. Phys. A* **75**, 237 (2002).
16. В. М. Розенбаум, *Письма в ЖЭТФ* **79**, 475 (2004).
17. Yu. A. Makhnovskii, V. M. Rozenbaum, D.-Y. Yang, S. H. Lin, and T. Y. Tsong, *Phys. Rev. E* **69**, 021102 (2004).
18. V. M. Rozenbaum, D.-Y. Yang, S. H. Lin, and T. Y. Tsong, *J. Phys. Chem. B* **108**, 15880 (2004).
19. P. Hänggi, P. Talkner, and M. Borkovec, *Rev. Mod. Phys.* **62**, 251 (1990).
20. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Наука, М. (1989) [L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum mechanics. Non-relativistic theory*, Pergamon Press, Oxford (1965)].
21. В. И. Гольданский, *Докл. АН СССР* **124**, 1261 (1959).
22. В. И. Гольданский, *Докл. АН СССР* **127**, 1037 (1959).
23. В. И. Гольданский, Л. И. Трахтенберг, В. Н. Флеоров, *Туннельные явления в химической физике*, Наука, М. (1986) [V. I. Goldanskii, L. I. Trakhtenberg, and V. N. Fleurov, *Tunneling phenomena in chemical physics*, Gordon and Breach Science Publishers, N.Y. (1989)].
24. L. I. Trakhtenberg, V. L. Klochikhin, and S. Ya. Pshezhetskii, *Chem. Phys.* **69**, 121 (1982).
25. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Физическая кинетика*, Наука, М. (1979).
26. В. М. Розенбаум, И. В. Шапочкина, Ё. Тераниши, Л. И. Трахтенберг, *Письма в ЖЭТФ* **107**, 525 (2018) [V. M. Rozenbaum, I. V. Shapochkina, Y. Teranishi, and L. I. Trakhtenberg, *JETP Lett.* **107**, 506 (2018)].
27. R. D. Astumian and P. Hanggi, *Phys. Today* **55**(11), 33 (2002).
28. V. M. Rozenbaum, O. Ye. Vovchenko, and T. Ye. Korochkova, *Phys. Rev. E* **77**, 061111 (2008).
29. L. Gammaitoni, P. Hänggi, P. Jung, and F. Marchesoni, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 223 (1998).
30. R. A. Marcus, *J. Chem. Phys.* **20**, 359 (1952).
31. R. A. Marcus, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **15**, 155 (1964).
32. R. R. Dogonadze, A. M. Kuznetsov, and V. G. Levich, *Electrochim. Acta* **13**, 1025 (1968).
33. A. M. Kuznetsov, *Charge Transfer in Physics, Chemistry and Biology*, Gordon and Breach, N.Y. (1995).
34. G. K. Ivanov, M. A. Kozhushner, and L. I. Trakhtenberg, *J. Chem. Phys.* **113**, 1992 (2000).
35. А. И. Ларкин, Н. Овчинников, *Письма в ЖЭТФ* **37**, 322 (1983).
36. A. J. Leggett, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **69**, 80 (1980).
37. A. O. Calderia and A. J. Leggett, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 211 (1981).
38. A. J. Leggett, *Phys. Rev. B* **30**, 1208 (1984).
39. А. И. Ларкин, Н. Овчинников, *ЖЭТФ* **86**, 719 (1984).
40. O. Kedem, B. Lau, M. A. Ratner, and E. A. Weiss, *PNAS* **114**, 8698 (2017).

Эффективный гамильтониан топологически защищенного кубита в геликоидальном кристалле

Р. А. Ниязов⁺¹⁾, Д. Н. Аристов^{+*×}, В. Ю. Качоровский*

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

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

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

Поступила в редакцию 20 июля 2023 г.

После переработки 25 июля 2023 г.

Принята к публикации 25 июля 2023 г.

Рассмотрена сверхрешетка, образованная туннельно связанными одинаковыми антиточками, периодически расположенными в двумерном топологическом изоляторе, помещенном в магнитное поле. Спектр сверхрешетки можно контролировать затворными электродами или меняя магнитный поток через антиточку. Показано, что на границе между двумя областями с разными потоками возникает топологически защищенный кубит, свойства которого зависят от скачка потока и могут управляться напряжением на затворах. Получен эффективный гамильтониан такого кубита, и проанализирована зависимость его свойств от основных параметров сверхрешетки: туннельной связи между антиточками и вероятности прыжков с переворотом спина.

DOI: 10.31857/S1234567823170123, EDN: kbpddk

Введение. Последнее десятилетие активно обсуждаются электрические и оптические свойства топологических изоляторов, т.е. материалов, объем которых является изолятором, а на границе существуют проводящие состояния [1, 2, 3]. Свойства этих состояний зависят от размерности материала. В двумерных топологических изоляторах на краю существуют геликоидальные краевые состояния (ГКС), переносящие бездиссипативный ток. Такие одномерные состояния характеризуются определенной киральностью, т.е. электроны с противоположным спином распространяются в противоположных направлениях. Обычный (немагнитный) беспорядок не может перевернуть спин электрона и именно благодаря этому свойству в таких каналах отсутствует рассеяние назад и диссипация.

Наиболее известная реализация двумерных топологических изоляторов – это квантовые ямы в соединениях на основе HgTe, топологические свойства которых были предсказаны теоретически [4, 5] и подтверждены серией экспериментов, включая измерения проводимости краевых состояний [6] и экспериментальные доказательства нелокального переноса [7–10].

Одним из новых и перспективных направлений

исследований является интерферометрия на основе ГКС. Наиболее интересные возможности возникают при наличии магнитного поля, которое привносит в проблему дополнительную физику, контролируя интерференцию за счет эффекта Ааронова–Бома (АБ). Этот эффект проявляется в объемных свойствах двумерных топологических изоляторов [11–15], а также в системах с ГКС и интерферометрах на их основе [15–21].

Обычно интерференция подавляется, когда температура, T , становится больше, чем расстояние между уровнями квантования в системе. Как было недавно теоретически продемонстрировано [18–21], это не так для АБ интерферометров на основе ГКС, где интерференция сохраняется даже для случая $T \gg 2\pi v_F / (L_1 + L_2)$ (здесь $L_{1,2}$ – длины плеч интерферометра, а v_F – скорость Ферми). Это означает, что интерференционные эффекты в системах на основе ГКС можно изучать при относительно высоких температурах, практически важных для различных приложений.

Одним из перспективных направлений дальнейших исследований является изучение метаматериалов на основе ГКС, таких как геликоидальные кристаллы. Такой кристалл можно создать путем химического травления отверстий через слой двумерного топологического материала. На краях таких отвер-

¹⁾e-mail: r.niyazov@mail.ioffe.ru

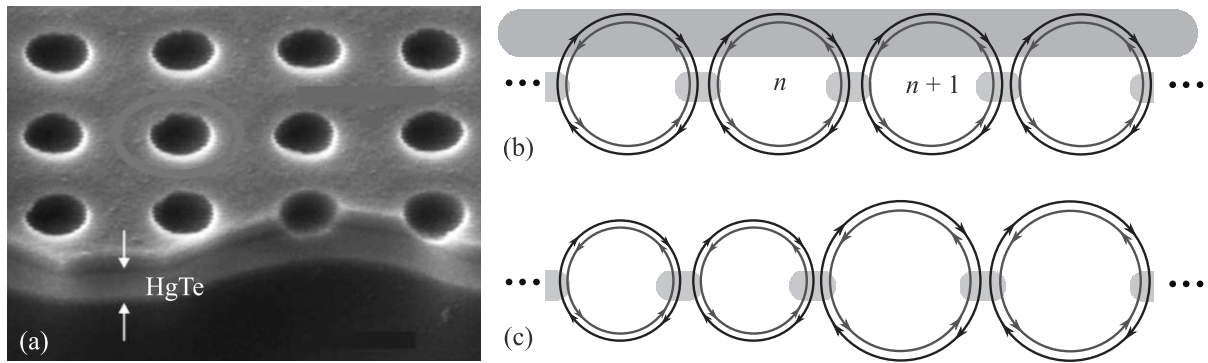


Рис. 1. (Цветной онлайн) (a) Пример экспериментальной реализации геликоидального кристалла, взято из работы [22]. (b) – Одномерная цепочка геликоидальных колец, образованных ГКС (обозначены красным и синим цветом) соединенными туннельными или баллистическими контактами (обозначены серым цветом). Управляющий затвор приложен к верху кристалла (обозначен светло-голубым). (c) – Граница между двумя полубесконечными областями массива колец с разными радиусами, на которой происходит скачок потока и, как следствие, образование локализованного кубита

ствий возникают ГКС, связанные между собой туннельно или электрически. Недавно уже сообщалось о первых экспериментальных реализациях систем периодически расположенных дырок в структурах на основе HgTe/CdTe [22, 23]. Изучались магнетотранспортные свойства периодических массивов таких дырок. Расстояние между дырками было достаточно велико, так что туннелирование между ГКС даже в топологической фазе было невозможно. Аналогичные структуры с более коротким расстоянием между вытравленными отверстиями и, следовательно, более сильной туннельной связью между ГКС, соответствующими соседним отверстиям, могли бы демонстрировать туннельный транспорт. Более того, туннельные барьеры между отверстиями можно контролировать с помощью затворных электродов. Таким образом, можно изготовить одно- или двумерный массив ГКС с туннельной связью. Такая система представляет собой геликоидальный кристалл.

Простейшая реализация такого кристалла, а именно, одномерный периодический массив близко расположенных одинаковых вытравленных отверстий [24] была недавно рассмотрена теоретически. Мы показали, что зонная структура кристалла может управляться как затворными электродами, так и внешним магнитным полем, изменяя магнитный поток через антиточку.

Было продемонстрировано, что изменение магнитного поля позволяет создавать в спектре точки Дирака. Такие точки появляются при особых значениях поля, соответствующих целому или полуцелому кванту магнитного потока через отверстие. Отклонение потока от специальных значений приводит к возникновению щелей, т.е. генерации конечной массы дираковских фермионов. В таком кристалле мож-

но создавать разного рода дефекты, например, вставляя в кристалл одну антиточку другого размера, через которую проходит магнитный поток, отличный от потока через другие точки. Можно также соединить две области с разными размерами антиточек, чтобы на границе возник скачок потока (см. рис. 1). Также скачок потока (СкП) можно создать, прикладывая неоднородное магнитное поле к массиву одинаковых точек. Как мы покажем ниже, СкП приводит к возникновению двухкратно вырожденных топологически защищенных состояний типа Волкова–Панкратова [25]. Вырождение можно снять, изменив магнитное поле или, что еще важнее, чисто электрическим путем, изменив потенциалы затворов. Это означает формирование топологически защищенного кубита, которым можно манипулировать с помощью затворных электродов.

Целью настоящей работы является вывод эффективного гамильтониана, описывающего данный кубит и анализ зависимости свойств кубита от ключевых параметров сверхрешетки: туннельной связи между антиточками и вероятности туннельных прыжков с переворотом спина.

Модель. Мы изучаем одномерный массив антиточек (вытравленных отверстий) на поверхности двумерного спин-холловского изолятора (см. рис. 1a). На границах отверстий существуют ГКС, в целом образуя цепочку из одинаковых геликоидальных колец с длиной окружности $L = L_1 + L_2$, соединенных последовательно (см. рис. 1b); для простоты мы будем считать $L_1 = L_2$. Каждое кольцо содержит электроны, движущиеся по часовой стрелке и против часовой стрелки с энергией E , и импульсом $k = E/v_F$, со спинами, противоположными в каждой точке. К массиву приложено однородное магнитное

поле, которое создает поток Φ в каждом кольце. В этой статье, мы ограничимся рассмотрением не взаимодействующей системы. Интересные задачи, которые возникают при учете электрон-электронного взаимодействия, будут сформулированы в заключении работы.

Предположим, что X -переход между двумя соседними кольцами с четырьмя каналами рассеяния описывается матрицей рассеяния общего вида (с точностью до несущественных фаз) $\hat{S}$, сохраняющей симметрию относительно обращения времени [26, 27]:

$$C'_\alpha = S_{\alpha\beta} C_\beta, \quad \alpha, \beta = 1, 2, 3, 4; \quad (1)$$

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} 0 & t & f & ir^* \\ t & 0 & ir & f \\ -f & ir & 0 & t \\ ir^* & -f & t & 0 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Здесь C'_α и C_β – амплитуды исходящей и входящей волн соответственно, а действительные амплитуды $t = \cos \alpha$, $f = \sin \alpha \sin \beta$, $r = \sin \alpha \cos \beta e^{iv/2}$ удовлетворяют условию $t^2 + |r|^2 + f^2 = 1$. Строго говоря, амплитуды t и f могут быть выбраны комплекснозначными, но их фаза выпадает из дисперсионных соотношений, обсуждаемых ниже, и может быть опущена, см. обсуждение в [24].

Физически, амплитуды r и f описывают перескоки между кольцами в состоянии с одинаковой и противоположной проекциями спина соответственно. Параметр α связан с полной вероятностью такого скачка: $|r|^2 + f^2 = \sin^2 \alpha$. Иными словами, угол α отвечает за туннельную связь между кольцами, и при $\alpha = 0$ кольца независимы. Для туннельного контакта ($\alpha \ll 1$), величина α , в основном, определяется расстоянием туннелирования. Случай баллистического (или металлического) контакта, когда кольца сильно связаны, соответствует $\alpha \approx \pi/2$. Угол 2β – это угол между осями квантования спина в различных спиральных состояниях [28], а элементы r и f пропорциональны перекрытию спиноров в ГКС в соседних антиточках. Соответственно, β отвечает за вероятность спин-флип перескоков между кольцами. При $\beta = 0$, амплитуда f также обращается в ноль и, как следствие, процессы с переворотом спина отсутствуют.

Фаза v является чрезвычайно важным параметром, от которого зависит качественная картина спектра. Принципиально важно, что этим параметром можно управлять чисто электрически, меняя напряжение на затворах [24].

Далее вводится матрица переноса, $\hat{T}$, описываю-

щая переход от n -й к $(n+1)$ -й ячейке спирального кристалла:

$$\hat{T} = \hat{P}\hat{T}_0 \quad (3)$$

где T_0 и P описывают переходы через контакт и кольцо соответственно. Матрица контакта, T_0 , соответствует матрице $\hat{S}$ и выражает амплитуды волновой функции в $(n+1)$ -м кольце (сразу после контакта) через амплитуды в n -м кольце (непосредственно перед контактом). Матрица

$$\hat{P} = \text{diag}[e^{i\varphi_b}, e^{-i\varphi_a}, e^{i\varphi_a}, e^{-i\varphi_b}], \quad (4)$$

содержит фазы, приобретаемые внутри кольца при переходе от левого контакта к правому:

$$\varphi_a = \frac{\varepsilon}{2} - \pi\phi, \quad \varphi_b = \frac{\varepsilon}{2} + \pi\phi, \quad (5)$$

где мы ввели безразмерную энергию и безразмерный поток:

$$\varepsilon = \frac{EL}{v_F} = kL, \quad \phi = \frac{\Phi}{\Phi_0}, \quad (6)$$

где Φ_0 – квант потока.

Общее дисперсионное уравнение. Зонная структура кристалла определяется из соотношения, связывающего амплитуды на n -м кольце с амплитудами на $(n+1)$ -м кольце $\psi_{n+1} = \hat{T}\psi_n = e^{iq}\psi_n$. Это приводит к уравнению:

$$\det[\hat{1}e^{iq} - \hat{T}] = 0, \quad (7)$$

где $\hat{1}$ – это 4×4 единичная матрица. Результирующее дисперсионное уравнение $\varepsilon(q)$ может быть найдено в неявной форме:

$$\begin{aligned} & (\cos \beta \sin(\varepsilon/2 + \pi\phi) + \sin \alpha \cos(q - v/2)) \times \\ & \times (\cos \beta \sin(\varepsilon/2 - \pi\phi) + \sin \alpha \cos(q + v/2)) + \\ & + \frac{1}{2} \sin^2 \beta (\cos^2 \alpha \cos 2\pi\phi - \sin^2 \alpha \cos v - \cos \varepsilon) = 0. \end{aligned} \quad (8)$$

Дираковские точки. Наиболее интересное свойство уравнения (8) – наличие дираковских точек в зависимости $\varepsilon(q)$. Такие точки появляются при целых и полужелых значениях безразмерного потока. Дираковские точки появляются в окрестности целых значений q/π для целых ϕ и полужелых значений q/π – для полужелых ϕ . Сначала обсудим спектр для случая близкого к целому значению потока. Положение дираковских точек можно представить в виде: $\varepsilon_{\text{DP}} = 2\pi n - 2(-1)^{n+m+p}\Theta$, $\phi_{\text{DP}} = p$, $q_{\text{DP}} = \pi m$. Здесь n, p – целые числа, $m = (-1, 0)$, а $\Theta = \arcsin[\sin \alpha \cos \beta \cos(v/2)]$. Для слабой туннельной связи величина Θ мала: $\Theta \propto \alpha \ll 1$.

В окрестности дираковских точек спектр можно записать в виде [24]:

$$\delta\varepsilon = \pm \sqrt{(A\delta q + B\delta\phi)^2 + C^2(\delta\phi)^2}, \quad (9)$$

где $\delta\varepsilon$, δq , и $\delta\phi$ отсчитываются от значений $\varepsilon_{\text{ДР}}$, $q_{\text{ДР}}$ и $\phi_{\text{ДР}}$, соответственно. Как следует из этого уравнения, щель в спектре определяется выражением

$$\Delta_{\text{ДР}} = 2C|\delta\phi|. \quad (10)$$

Коэффициенты B и C одинаковы для всех дираковских точек, тогда как A имеет разный знак, но одинаковые абсолютные значения: $A = 2(-1)^{n+m+p} \sin \alpha \sin \xi / \cos \Theta$, $B = 2\pi \cos \beta \sin(v/2) / \sin \xi$, $C = 2\pi \cos \alpha \sin \beta / (\sin \xi \cos \Theta)$, и $\xi = \arccos[\cos \beta \cos(v/2)]$.

Заметим, что $A \rightarrow 0$ для $\alpha \rightarrow 0$, таким образом отражая существование плоских зон в этом пределе. О дираковских точках имеет смысл говорить, если ширина зоны больше величины дираковской щели, $A \gg \Delta_{\text{ДР}}$.

При $\beta = 0$, геликоидальные каналы не связаны друг с другом. В этом случае, $C = 0$ и спектр приобретает вид

$$\delta\varepsilon = |A\delta q + B\delta\phi|. \quad (11)$$

Следовательно, в этом частном случае мы имеем бесщелевой спектр для любого значения $\delta\phi$.

Спектр для случая почти полужелтых значений потока ϕ имеет другой набор дираковских точек: $\varepsilon_{\text{ДР}} = 2\pi(n + \frac{1}{2}) - 2(-1)^{n+m+p}\Theta$, $\phi_{\text{ДР}} = m + 1/2$, $q_{\text{ДР}} = \pi r + \pi/2$. Уравнение (9) остается верным в этом случае с заменой $v \rightarrow v + \pi$ в коэффициентах A, B, C и в определениях Θ и ξ . При малых $v \ll 1$ выражения для коэффициентов в (9) упрощаются, $A \simeq 2(-1)^{n+m+p} \sin \alpha$, $B \simeq 2\pi \cos \beta$, $C \simeq 2\pi \cos \alpha \sin \beta$, $2\Theta \simeq -v \sin \alpha \cos \beta$.

Эффективный гамильтониан для дираковской точки. Возможно, самый простой способ получить эффективный гамильтониан вблизи точек Дирака – это “возвести в квадрат” дисперсионное соотношение. А именно, вместо (7) мы рассматриваем матрицу перехода ко второму соседу, $\psi_{n+2} = \hat{T}^2 \psi_n = e^{2iq} \psi_n$, что приводит к уравнению

$$\det[\hat{1}e^{i2q} - \hat{T}^2(\varepsilon)] = 0. \quad (12)$$

Для конкретности рассмотрим $\phi \simeq 1/2$, когда положения точек Дирака даются $q_{\text{ДР}} = \pm\pi/2$, так что $e^{2iq_{\text{ДР}}} = -1$. Можно проверить, что $\hat{T}^2 = -\hat{1}$ также и для $\varepsilon = \varepsilon_{\text{ДР}}$, хотя $\hat{T}$ при этом не диагональна. Это свойство упрощает разложение вблизи точек Дирака: $q = \pm\pi/2 + \delta q$, $\varepsilon = \pi + \delta\varepsilon$, $\phi = 1/2 + \delta\phi$, $v = \delta v$

($\delta\phi \ll 1$, $\delta q \ll 1$, $\delta v \ll 1$). Зависимость от энергии в (12) содержится в матрице $\hat{P}$, которая входит в определение $\hat{T}$. Разлагая эту матрицу по $\delta\varepsilon$ вплоть до второго порядка малости, напомним

$$\hat{P} = \hat{P}_\pi(1 - \hat{I}\delta\varepsilon/2 - \delta\varepsilon^2/8). \quad (13)$$

Здесь $\hat{P}_\pi = \hat{P}(\varepsilon = \pi)$ и $\hat{I} = \text{diag}[-i, i, -i, i]$.

Для того, чтобы получить эффективный гамильтониан, описывающий кристалл в окрестности дираковской точки, мы в качестве первого шага разложим выражение под детерминантом в (12) по $\delta\varepsilon$ вплоть до второго порядка малости:

$$(\hat{M}_0 + \hat{M}_1\delta\varepsilon + \hat{M}_2\delta\varepsilon^2)\psi_n = 0, \quad (14)$$

где

$$\hat{M}_0 = (P_\pi T_0)^2 - e^{2iq},$$

$$\hat{M}_1 = -\frac{1}{2}P_\pi(\hat{T}_0\hat{I} + \hat{I}T_0)P_\pi T_0, \quad (15)$$

$$\hat{M}_2 = \frac{1}{4}\hat{P}_\pi\hat{I}(T_0\hat{I} + \hat{I}T_0)P_\pi T_0.$$

При выводе мы использовали, что $[\hat{I}, \hat{P}_\pi] = 0$. Уравнение (14) переписывается в виде

$$(\hat{1}\delta\varepsilon + \hat{M}_1^{-1}\hat{M}_0 + \hat{M}_1^{-1}\hat{M}_2\delta\varepsilon^2)\psi_n = 0. \quad (16)$$

Домножая слева на $(\hat{1} - \hat{M}_1^{-1}\hat{M}_2\delta\varepsilon)$ и отбрасывая слагаемые $\sim \delta\varepsilon^3$, получим $((\hat{1} - \hat{M}_1^{-1}\hat{M}_2\hat{M}_1^{-1}\hat{M}_0)\delta\varepsilon + \hat{M}_1^{-1}\hat{M}_0)\psi_n = 0$. Это можно представить в виде уравнения Шредингера

$$\begin{aligned} \delta\varepsilon \psi_n &= -(\hat{1} - \hat{M}_1^{-1}\hat{M}_2\hat{M}_1^{-1}\hat{M}_0)^{-1}\hat{M}_1^{-1}\hat{M}_0\psi_n \simeq \\ &\simeq -(\hat{M}_1^{-1}\hat{M}_0 + \hat{M}_1^{-1}\hat{M}_2(\hat{M}_1^{-1}\hat{M}_0)^2)\psi_n. \end{aligned} \quad (17)$$

Следующий шаг – провести разложение по $\delta\phi, \delta q$ и δv . Как несложно увидеть, матрица $\hat{M}_0$ тождественно обращается в ноль при $\delta\phi = \delta q = \delta v = 0$. Поэтому, $\delta\varepsilon$ мало. В дальнейшем мы будем считать, что $\delta\varepsilon \lesssim \delta\phi \sim \delta q \sim \delta v$. Тогда последний член в (17) мал и в первом порядке малости его можно отбросить.

Первый порядок по $\delta\phi, \delta v, \delta q$ and $\delta\varepsilon$. Сначала мы проведем вычисления в линейном порядке по $\delta\phi, \delta v, \delta q$ и $\delta\varepsilon$. В этом порядке имеем,

$$(\hat{1}\delta\varepsilon + \hat{M}_1^{-1}\hat{M}_0)\psi_n = 0. \quad (18)$$

Заметим, что матрица $\hat{M}_1^{-1}\hat{M}_0$ не эрмитова, но может быть приведена к эрмитовой форме преобразованием подобия $\hat{R}$. Возникающий после такого преобразования эрмитов оператор

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}^{(1)} = -\hat{R}^{-1}\hat{M}_1^{-1}\hat{M}_0\hat{R} \quad (19)$$

обладает тем же законом дисперсии (в окрестности дираковской точки) и имеет смысл эффективного гамильтониана.

Выбор матрицы $\hat{R}$ неоднозначен и заслуживает отдельного комментария. Опуская простые технические детали, мы изложим общую идею. Для начала можно найти матрицу, диагонализующую $\hat{M}_1^{-1}\hat{M}_0$ в простейшем случае $\delta\phi = 0$. При этом диагонализующая матрица R_* может быть без ограничения общности умножена справа на диагональную матрицу $\hat{C} = \text{diag}[c_1, c_2, c_3, c_4]$, с произвольными коэффициентами c_i . Без ограничения общности, можно потребовать условия $c_1 c_2 c_3 c_4 = 1$ и параметризовать $\hat{C}$ в следующем виде $\hat{C} = \text{diag}[ac, ac^{-1}, a^{-1}c', a^{-1}c'^{-1}]$. Действуя теперь матрицей R_* на $\hat{M}_1^{-1}\hat{M}_0$ при $\delta\phi \neq 0$, мы получаем блочную матрицу,

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}^{(1)} = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_1 & 0 \\ 0 & \mathcal{H}_2 \end{pmatrix}. \quad (20)$$

Гамильтонианы $\mathcal{H}_{1,2}$ недиагональны (в меру $\delta\phi$) и, вообще говоря, не являются эрмитовыми, но могут быть приведены к эрмитовому виду при определенных c, c' . Таким образом, анализ в рамках низшего порядка оставляет произвол в виде произвольного коэффициента a . Как будет видно из анализа более высоких порядков, естественно выбрать $|a| = 1$ и подобрать удобным образом фазу этого коэффициента.

Соответствующая матрица подобия принимает вид:

$$R = \begin{pmatrix} -i\tau^\alpha\tau^\beta & i & -\tau^\beta & \tau^\alpha \\ 1 & \tau^\alpha\tau^\beta & -i\tau^\alpha & -i\tau^\beta \\ \tau^\alpha & \tau^\beta & -i & -i\tau^\alpha\tau^\beta \\ -i\tau^\beta & i\tau^\alpha & -\tau^\alpha\tau^\beta & 1 \end{pmatrix}, \quad (21)$$

$$\tau^\alpha = \tan(\frac{\pi}{4} + \frac{\alpha}{2}), \quad \tau^\beta = \tan \frac{\beta}{2},$$

а блоки эффективного гамильтониана имеют вид

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1 &= \delta v \sin \alpha \cos \beta \sigma_0 + 2\pi\delta\phi \cos \alpha \sin \beta \sigma_1 + \\ &+ (2\pi\delta\phi \cos \beta + 2\delta q \sin \alpha) \sigma_3, \\ \mathcal{H}_2 &= -\delta v \sin \alpha \cos \beta \sigma_0 + 2\pi\delta\phi \cos \alpha \sin \beta \sigma_1 + \\ &+ (2\pi\delta\phi \cos \beta - 2\delta q \sin \alpha) \sigma_3. \end{aligned} \quad (22)$$

Здесь $\sigma_{1,3}$ – матрицы Паули, а σ_0 – единичная матрица. Эти формулы согласуются с уравнением (9) выше.

Блок $\mathcal{H}_2$ гамильтониана можно получить из $\mathcal{H}_1$ заменой $\delta q \rightarrow -\delta q$ и $\delta v \rightarrow -\delta v$ (или $\alpha \rightarrow -\alpha$). Член с δv может быть поглощен сдвигом энергии в каждом из двух блоков:

$$E_1 = -E_2 = -W, \quad (23)$$

где

$$W = \delta v \cos \beta \sin \alpha. \quad (24)$$

Поэтому мы можем обсудить только блок $\mathcal{H}_1$. Малый сдвиг волнового вектора, $\delta q \ll 1$, можно представить как движение электрона вдоль массива колец, $\delta q = -id/dx$, где x – координата вдоль этого массива в единицах диаметра кольца, L/π . Делая перемасштабирование этой безразмерной координаты: $2 \sin \alpha \bar{x} = x$, находим $2 \sin \alpha \delta q = -i \frac{\partial}{\partial \bar{x}}$. Наконец, $\bar{\mathcal{H}}_1$ становится гамильтонианом массивной дираковской частицы:

$$\bar{\mathcal{H}}_1 = \begin{pmatrix} \bar{\phi} - i \frac{\partial}{\partial \bar{x}} & h \\ h & -\bar{\phi} + i \frac{\partial}{\partial \bar{x}} \end{pmatrix}, \quad (25)$$

где $\bar{\phi} = 2\pi\delta\phi \cos \beta$ и $h = 2\pi\delta\phi \sin \beta \cos \alpha$. Дисперсия такого гамильтониана для плоской волны $e^{i\bar{q}\bar{x}}$ определяется выражением $E^2 = (\bar{q} + \bar{\phi})^2 + h^2$, где

$$\bar{q} = 2 \sin \alpha \delta q = -i \frac{d}{d\bar{x}}. \quad (26)$$

Второй порядок по $\delta\phi, \delta v, \delta q$ and $\delta\epsilon$. Разложим теперь уравнение (12) до второго порядка по $\delta\phi, \delta q$ и $\delta\epsilon$. Для этого используем следующие выражения:

$$\det[\delta\epsilon + \hat{M}_1^{-1}\hat{M}_0 + \hat{M}_1^{-1}\hat{M}_2(\hat{M}_1^{-1}\hat{M}_0)^2] = 0, \quad (27)$$

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = -R^{-1}(\hat{M}_1^{-1}\hat{M}_0 + \hat{M}_1^{-1}\hat{M}_2(\hat{M}_1^{-1}\hat{M}_0)^2)R. \quad (28)$$

Поправки к $\mathcal{H}_{\text{eff}}$ бывают двух типов: поправки к $\bar{\mathcal{H}}_1$ и $\bar{\mathcal{H}}_2$, которые не приводят к антипересечению и могут быть здесь опущены, а также блочно-внедиагональные поправки, которые даются формулой

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{V} \\ \hat{V}^\dagger & 0 \end{pmatrix}. \quad (29)$$

С описанной выше точностью мы находим

$$\begin{aligned} \hat{V} &= (\delta q^2 - \pi^2 \delta\phi^2 \sin^2 \beta) \sin 2\alpha \hat{\sigma}_3 + \\ &+ \pi^2 \delta\phi^2 \sin \alpha \sin 2\beta \hat{\sigma}_1, \end{aligned} \quad (30)$$

где $\hat{\sigma}_i$ ($i = 0, 1, 2, 3$) – матрицы Паули.

Скачки потока в кристалле: топологически защищенные локализованные состояния. Обсудим теперь локализованные состояния вблизи СКП. Предположим, что имеются две полубесконечные области массива с разным значением потока (см. рис. 1с). В первой области при $x < 0$ поток меньше $1/2$, $\phi = 1/2 - \delta\phi$, а во второй, при $x > 0$, имеют $\phi = 1/2 + \delta\phi$. Задача полностью аналогична рассмотренной в работе [25]. Тогда на границе раздела

двух областей возникают два (поскольку гамильтониан имеет два блока) вырожденных локализованных состояния типа Волкова–Панкратова:

$$\begin{aligned}\psi_1^{\text{loc}} &= \begin{pmatrix} i \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-(|h|+i|\bar{\phi}|)|\bar{x}|}, \\ \psi_2^{\text{loc}} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ i \end{pmatrix} e^{-(|h|-i|\bar{\phi}|)|\bar{x}|}.\end{aligned}\quad (31)$$

Заметим, что мы опустили префактор $(-1)^n = \exp(\pm i\pi x)$ в обеих функциях, что соответствует упомянутому сдвигу $\delta q = q \pm \pi/2$ выше. Мы видим, что длины локализации этих локализованных состояний равны

$$L_{\text{loc}} = L \frac{\tan \alpha}{\pi^2 \delta \phi \sin \beta}. \quad (32)$$

При выводе мы предположили, что $L_{\text{loc}} \gg L$. При $\delta v = 0$, энергия, соответствующая этим вырожденным состояниям, лежит точно в середине дираковской щели, как и в задаче, обсуждаемой в [25].

Полученные выше локализованные топологически защищенные состояния образуют двухуровневую систему, или кубит. Энергетические уровни этой системы зависят от параметра δv , управляющего асимметрией системы вверх-вниз. Изменяя δv электродами затвора, можно манипулировать уровнями энергии $E_1 = E_1(\delta v)$ и $E_2 = E_2(\delta v)$, которые пересекаются друг с другом при $\delta v = 0$. В этой точке уровни двукратно вырождены в низшем приближении по $\delta \phi$, δq .

В следующем разделе мы покажем, что на самом деле, между этими уровнями имеется антипересечение, так что возникает “отталкивание уровней” из-за поправок к эффективному гамильтониану, см. (30).

Эффективный гамильтониан кубита. Проецируя $H_{\text{eff}}^{(1)} + H_{\text{eff}}^{(2)}$ на два локализованных состояния, ур. (31), мы получаем гамильтониан кубита, образованного ψ_1^{loc} и ψ_2^{loc} :

$$\mathcal{H}_{\text{qubit}} = \begin{pmatrix} W & \Delta \\ \Delta^* & -W \end{pmatrix}. \quad (33)$$

Здесь W линейно зависит от δv согласно уравнению (24), $\Delta = \Delta_x - i\Delta_y = 2\pi\delta\phi^2 \cot \alpha \sin \beta (i \cos \alpha \cos \beta - \sin \beta)$. Соответствующие энергетические уровни даются выражением

$$E_{\text{qubit}}^{\pm} = \pm \sqrt{W^2 + |\Delta|^2}, \quad (34)$$

где

$$|\Delta| = 2\pi^2 \delta \phi^2 \sin \beta \cos \alpha \sqrt{\cot^2 \alpha + \sin^2 \beta}. \quad (35)$$

Уровни кубита изображены на рис. 2. Расстояние между уровнями зависит от туннельной связи между антиточками, контролируемой параметром α , и

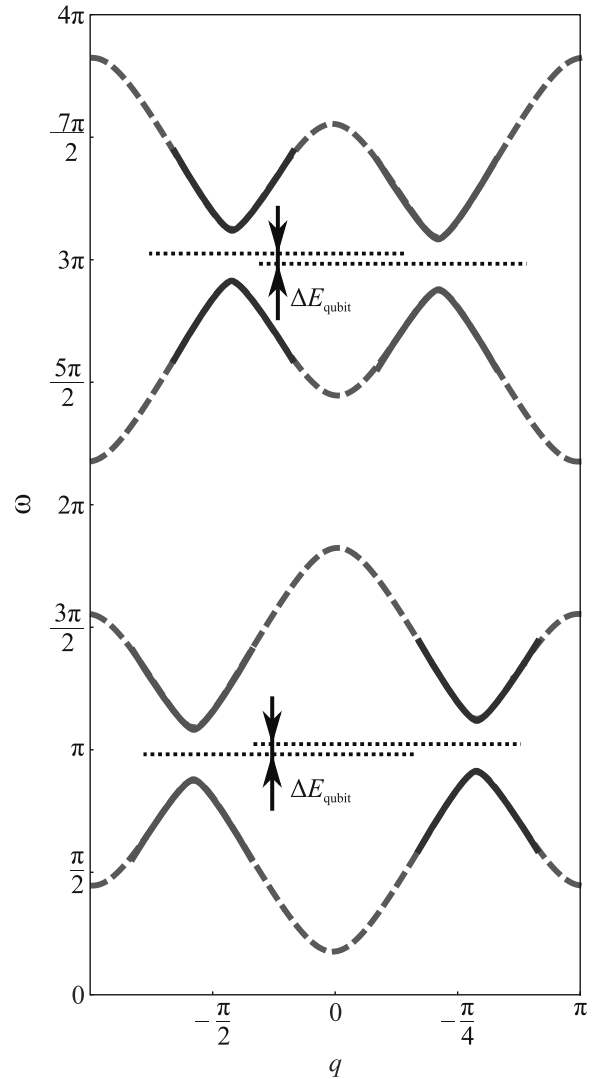


Рис. 2. (Цветной онлайн) Дисперсия низколежащих зон геликоидального кристалла. Вертикальное расстояние между дираковскими точками контролируется параметром v . Пунктирные линии показывают положение локализованных уровней, которые возникают при наличии скачка потока в кристалле. $\Delta E_{\text{qubit}} = E_{\text{qubit}}^+ - E_{\text{qubit}}^-$, см. уравнение (34)

от вероятности туннельного прыжка с переворотом спина, которая зависит от β . Видно, что в отсутствие спин-флип процессов, т.е. при $\beta = 0$, мы имеем

$\Delta = 0$. Заметим также, что в пределе малых α выражение (35) можно представить в виде

$$|\Delta| \propto |\delta\phi| \Delta_{\text{DP}}/A, \quad (36)$$

откуда видно, что стационарный кубит существует при $|\delta\phi| < A \propto \alpha$. В противном случае, $|\delta\phi| \geq A$, уровни кубита переходят в сплошной спектр, $|\Delta| \geq \Delta_{\text{DP}}$, т.е. становятся резонансами и распадаются за конечное время. Таким образом, для существования стационарного кубита туннельная связь между антиоточками должна быть не слишком маленькой.

Кубит эквивалентен спину $1/2$ в “магнитном поле”

$$\mathbf{B}_{\text{qubit}} = (\Delta_x, \Delta_y, W). \quad (37)$$

Самое главное, что “магнитное поле” $\mathbf{B}_{\text{qubit}}$ на самом деле зависит от напряжения на затворе и может управляться чисто электрическим способом. Заметим также, что такие кубиты существуют во всех зонах, так что при высокой температуре в температурном окне находится ансамбль кубитов, числом $\sim TL/v_F$. Этими кубитами можно когерентно управлять с помощью вентиля и магнитного поля.

Выводы. В настоящей работе, мы построили теорию перестраиваемого кристалла, образованного периодическим набором одинаковых отверстий в двумерном топологическом изоляторе. Мы продемонстрировали, что туннельным транспортом через такой массив можно управлять как магнитным полем, так и чисто электрическим путем, используя различные конфигурации электродов затвора.

Мы вывели эффективный гамильтониан, описывающий топологически защищенные локализованные состояния, возникающие около СКП в таком кристалле. Конкретно, мы показали, что на границе между областями с разными радиусами колец (или между двумя областями с разным магнитным полем), возникают два локализованных состояния, которые образуют кубит, помещенный в эффективное “магнитное поле” $\mathbf{B}_{\text{qubit}}$, см. уравнение (37). Принципиально важно, что эффективное поле зависит от напряжения на затворе, так что состоянием кубита можно управлять чисто электрически.

В кристалле с несколькими границами между разными областями возникают пространственно разделенные кубиты. Меняя (адиабатически или резко) внешние параметры, например, напряжение на затворе, от которого зависит $\mathbf{B}_{\text{qubit}}$, можно контролировать одиночный кубит и создавать запутанные состояния с участием кубитов, находящиеся на разных границах. Более того, даже на одной границе может возникнуть ансамбль из $N \sim TL/v_F$ топологически защищенных кубитов при относительно высоких

температурах, $T \gg v_F/L$, когда температурное окно охватывает много зон кристалла и, следовательно, включает множество массивных конусов Дирака. Анализ квантовых вычислений ансамблем энергетически разделенных кубитов в интерферометре АБ был представлен в нашей недавней работе [19]. Обобщение результатов [19] на геликоидальный кристалл является интересной задачей для дальнейшего развития интерферометрии на основе ГКС.

Наметим также ряд проблем, которые можно было бы рассмотреть в дальнейших исследованиях. Наиболее интересным представляется изучение роли электрон-электронного взаимодействия. Такое взаимодействие может привести к нескольким нетривиальным эффектам. Во-первых, при учете этого взаимодействия возможна реконструкция края [29] для некоторых моделей удерживающего потенциала на краю образца. В этом случае, при определенных предположениях относительно краевого потенциала, может возникнуть больше двух краевых проводящих состояний. Кроме того, взаимодействие приводит к перенормировке матрицы рассеяния, описывающей перескоки между соседними кольцами. Такая перенормировка может сильно поменять параметры α и β , описывающие перескоки между соседними кольцами [27]. Наконец, межэлектронное взаимодействие приводит к дефазировке геликоидальных состояний. Было бы интересно прояснить, как такая дефазировка будет влиять на времена релаксации (так называемое время T_1) и дефазировки (время T_2) кубита. Ожидается, что при низких температурах, $T \ll \Delta_{\text{DP}}$, скорость релаксации, T_1^{-1} , будет подавлена по аналогии со сверхпроводящим случаем, когда температура становится ниже сверхпроводящей щели [30], в отличие от дефазировки, определяющейся виртуальными процессами. Также интересно проанализировать эффекты, связанные с несовершенством кристалла, которые приводят к случайным компонентам в матрице переноса. На качественном уровне такие эффекты должны приводить к появлению конечной длины локализации. Соответствующий теоретический анализ должен быть аналогичен анализу локализации в одномерной бесспиновой цепочке со случайной матрицей перескока между узлами (см. [31, 32]). Анализ этих важных проблем выходит за рамки данной статьи и может быть рассмотрен в будущих исследованиях.

Таким образом, мы продемонстрировали возможность создания управляемых кубитов в геликоидальном кристалле. Наиболее интересные приложения полученных результатов в области квантовых вычислений появляются за счет возможности чи-

сто электрического высокотемпературного управления кубитами.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда грант # 20-12-00147-П. Работа Р. А. Ниязова частично поддержана Фондом развития теоретической физики и математики “БАЗИС”.

1. B. Bernevig and T. Hughes, *Topological Insulators and Topological Superconductors*, Princeton University Press, Princeton (2013).
2. M. Z. Hasan and C. L. Kane, Rev. Mod. Phys. **82**, 3045 (2010).
3. X.-L. Qi and S.-C. Zhang, Rev. Mod. Phys. **83**, 1057 (2011).
4. C. L. Kane and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. **95**, 226801 (2005).
5. B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S. C. Zhang, Science **314**, 1757 (2006).
6. M. König, S. Wiedmann, C. Brune, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, Science **318**, 766 (2007).
7. A. Roth, C. Brüne, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, J. Maciejko, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, Science **325**, 294 (2009).
8. G. M. Gusev, Z. D. Kvon, O. A. Shegai, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretzky, and J. C. Portal, Phys. Rev. B **84**, 121302 (2011).
9. C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, E. M. Hankiewicz, L. W. Molenkamp, J. Maciejko, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, Nat. Phys. **8**, 485 (2012).
10. A. Kononov, S. V. Egorov, Z. D. Kvon, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretzky, and E. V. Deviatov, JETP Lett. **101**, 814 (2015).
11. H. Peng, K. Lai, D. Kong, S. Meister, Y. Chen, X. L. Qi, S. C. Zhang, Z. X. Shen, and Y. Cui, Nat. Mater. **9**, 225 (2010).
12. B. C. Lin, S. Wang, L. X. Wang, C. Z. Li, J. G. Li, D. Yu, and Z. M. Liao, Phys. Rev. B **95**, 235436 (2017).
13. J. H. Bardarson, P. W. Brouwer, and J. E. Moore, Phys. Rev. Lett. **105**, 156803 (2010).
14. J. H. Bardarson and J. E. Moore, Rep. Prog. Phys. **76**, 56501 (2013).
15. G. Gusev, Z. Kvon, O. Shegai, N. Mikhailov, and S. Dvoretzky, Solid State Commun. **205**, 4 (2015).
16. P. Delplace, J. Li, and M. Büttiker, Phys. Rev. Lett. **109**, 246803 (2012).
17. F. Dolcini, Phys. Rev. B **83**, 165304 (2011).
18. R. A. Niyazov, D. N. Aristov, and V. Y. Kachorovskii, Phys. Rev. B **98**, 045418 (2018).
19. R. A. Niyazov, D. N. Aristov, and V. Y. Kachorovskii, npj Computational Materials **6**, 174 (2020).
20. R. A. Niyazov, D. N. Aristov, and V. Y. Kachorovskii, Phys. Rev. B **103**, 125428 (2021).
21. R. A. Niyazov, D. N. Aristov, and V. Y. Kachorovskii, JETP Lett. **113**, 689 (2021).
22. H. Maier, J. Ziegler, R. Fischer, D. Kozlov, Z. D. Kvon, N. Mikhailov, S. A. Dvoretzky, and D. Weiss, Nat. Commun. **8**, 2023 (2017).
23. J. Ziegler, *Quantum transport in HgTe topological insulator nanostructures*, Ph.D. thesis, University of Regensburg, Regensburg (2019).
24. R. A. Niyazov, D. N. Aristov, and V. Y. Kachorovskii, (2023), Phys. Rev. B **108**, 075424 (2023).
25. B. A. Volkov and O. A. Pankratov, JETP Lett. **42**, 178 (1985).
26. J. C. Y. Teo and C. L. Kane, Phys. Rev. B **79**, 235321 (2009).
27. D. N. Aristov and R. A. Niyazov, Phys. Rev. B **94**, 035429 (2016).
28. D. N. Aristov, I. V. Gornyi, D. G. Polyakov, and P. Wölffe, Phys. Rev. B **95**, 155447 (2017).
29. J. Wang, Y. Meir, and Y. Gefen, Phys. Rev. Lett. **118**, 046801 (2017).
30. S. V. Maleyev, A. G. Yashenkin, and D. N. Aristov, Phys. Rev. B **50**, 13825 (1994).
31. V. I. Perel and D. G. Polyakov, JETP **59**, 204 (1984).
32. A. P. Dmitriev, JETP **68**, 132 (1989).

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

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

том 118

Выпуск 6

25 сентября 2023

*Журнал издается под руководством
Отделения физических наук РАН*

Главный редактор В. М. Пудалов

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

Зав. редакцией *И. В. Подыниглазова*

Адрес редакции 119334 Москва, ул. Косыгина 2

тел./факс (499)-137-75-89

e-mail letters@kapitza.ras.ru

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

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

Оценки абсолютных долей распадов $f_0(1710)$ и радиационных переходов $\psi(2S) \rightarrow \gamma f_0(1710)$ и $\Upsilon(1S) \rightarrow \gamma f_0(1710)$

Н. Н. Ачасов¹⁾, Г. Н. Шестаков

Лаборатория теоретической физики, Институт математики им. С. Л. Соболева Сибирского отделения РАН,
630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 7 июля 2023 г.

После переработки 12 июля 2023 г.

Принята к публикации 22 августа 2023 г.

Используя результаты коллаборации VES для $Br(J/\psi \rightarrow \gamma f_0(1710))$, мы оценили абсолютные доли распадов $f_0(1710)$ -резонанса на $\pi\pi$, $K\bar{K}$, $\eta\eta$ и впервые на $\omega\omega$ и $\omega\phi$. Кроме того, мы впервые оценили $Br(\psi(2S) \rightarrow \gamma f_0(1710)) \approx 3.5 \times 10^{-5}$ и $Br(\Upsilon(1S) \rightarrow \gamma f_0(1710)) \approx 1 \times 10^{-5}$.

DOI: 10.31857/S1234567823180015, EDN: wrjspm

Недавно на обновленной установке VES на ускорителе в Протвино была исследована реакция $\pi^- p \rightarrow \omega \phi n$ при импульсе $P_{\pi^-}^{\text{lab}} = 29$ ГэВ [1]. Проведенный анализ показал, что наблюдаемый сигнал в $\omega\phi$ -системе может быть описан вкладом известного скалярного резонанса $f_0(1710)$ [2]. Доминирующим механизмом реакции $\pi^- p \rightarrow f_0(1710)n$ при высоких энергиях и малых переданных импульсах является механизм однопионного обмена. Этот факт позволил авторам [1] найти величину произведения долей распадов $f_0(1710) \rightarrow \pi\pi$ и $f_0(1710) \rightarrow \omega\phi$:

$$Br(f_0(1710) \rightarrow \pi\pi)Br(f_0(1710) \rightarrow \omega\phi) = (4.8 \pm 1.2) \times 10^{-3}. \quad (1)$$

Затем, используя данные, указанные в Review of Particle Physics (RPP) [2] для распадов $J/\psi \rightarrow \gamma f_0(1710) \rightarrow \gamma\pi\pi$ и $J/\psi \rightarrow \gamma f_0(1710) \rightarrow \gamma\omega\phi$, они нашли произведение $Br(J/\psi \rightarrow \gamma f_0(1710) \rightarrow \gamma\pi\pi)Br(J/\psi \rightarrow \gamma f_0(1710) \rightarrow \gamma\omega\phi) = (9.5 \pm 2.6) \times 10^{-8}$, поделили его на свой результат (1), извлекли корень и таким образом получили полную долю распада $J/\psi \rightarrow \gamma f_0(1710)$ [1]:

$$\left[\frac{Br(J/\psi \rightarrow \gamma f_0(1710) \rightarrow \gamma\pi\pi)Br(J/\psi \rightarrow \gamma f_0(1710) \rightarrow \gamma\omega\phi)}{Br(f_0(1710) \rightarrow \pi\pi)Br(f_0(1710) \rightarrow \omega\phi)} \right]^{1/2} = \\ = Br(J/\psi \rightarrow \gamma f_0(1710)) = (4.46 \pm 0.82) \times 10^{-3}. \quad (2)$$

Эту величину они сравнили с известной долей распада $J/\psi \rightarrow \gamma f_0(1710) \rightarrow 5 \text{ channels}$, т.е. с $Br(J/\psi \rightarrow \gamma f_0(1710) \rightarrow (\gamma\pi\pi + \gamma K\bar{K} + \gamma\eta\eta + \gamma\omega\omega + \gamma\omega\phi)) = (2.13 \pm 0.18) \times 10^{-3}$ [2], и заключили, что на не зарегистрированные каналы приходится $Br(J/\psi \rightarrow \gamma f_0(1710) \rightarrow (\gamma 4\pi + \gamma\eta\eta' + \gamma\pi\pi K\bar{K} + \dots)) = (2.33 \pm 0.84) \times 10^{-3}$ [1].

Если поделить указанные в RPP [2] значения для долей распадов $J/\psi \rightarrow \gamma f_0(1710) \rightarrow \gamma\pi\pi$, $\gamma K\bar{K}$, $\gamma\eta\eta$, $\gamma\omega\omega$, $\gamma\omega\phi$ на величину $Br(J/\psi \rightarrow \gamma f_0(1710))$ из формулы (1), то мы получим абсолютные доли соответствующих распадов для самого $f_0(1710)$ -резонанса. Эти оценки приведены в табл. 1.

Таблица 1. Доли распадов $f_0(1710)$

$\pi\pi$	$K\bar{K}$	$\eta\eta$	$\omega\omega$	$\omega\phi$	Сумма
0.0852 ± 0.0193	0.213 ± 0.045	0.054 ± 0.029	0.070 ± 0.026	0.056 ± 0.017	0.478 ± 0.065

Отметим, что факторизация эффективных констант рождения и распада $f_0(1710)$ -резонанса позволяет найти отношение $Br(f_0 \rightarrow \pi\pi)/Br(f_0 \rightarrow K\bar{K})$ из данных по радиационным распадам J/ψ , $\psi(2S)$ и $\Upsilon(1S)$ [2] тремя разными способами:

¹⁾e-mail: achasov@math.nsc.ru; shestako@math.nsc.ru

$$\frac{Br(f_0(1710) \rightarrow \pi\pi)}{Br(f_0(1710) \rightarrow K\bar{K})} = \frac{Br(J/\psi \rightarrow \gamma f_0(1710) \rightarrow \gamma\pi\pi)}{Br(J/\psi \rightarrow \gamma f_0(1710) \rightarrow \gamma K\bar{K})} = 0.40 \pm 0.07, \quad (3)$$

$$\frac{Br(f_0(1710) \rightarrow \pi\pi)}{Br(f_0(1710) \rightarrow K\bar{K})} = \frac{Br(\psi(2S) \rightarrow \gamma f_0(1710) \rightarrow \gamma\pi\pi)}{Br(\psi(2S) \rightarrow \gamma f_0(1710) \rightarrow \gamma K\bar{K})} = 0.58 \pm 0.11, \quad (4)$$

$$\frac{Br(f_0(1710) \rightarrow \pi\pi)}{Br(f_0(1710) \rightarrow K\bar{K})} = \frac{Br(\Upsilon(1S) \rightarrow \gamma f_0(1710) \rightarrow \gamma\pi\pi)}{Br(\Upsilon(1S) \rightarrow \gamma f_0(1710) \rightarrow \gamma K\bar{K})} = 0.36 \pm 0.17. \quad (5)$$

Эти оценки в пределах ошибок согласуются друг с другом. Результат VES (см. (2)), факторизация и данные RPP [2] позволяют определить абсолютные доли радиационных распадов $\psi(2S) \rightarrow \gamma f_0(1710)$ и $\Upsilon(1S) \rightarrow \gamma f_0(1710)$ двумя способами (используя данные о каналах $f_0(1710) \rightarrow \pi\pi$ и $f_0(1710) \rightarrow K\bar{K}$):

$$Br(\psi(2S) \rightarrow \gamma f_0(1710)) = \frac{Br(\psi(2S) \rightarrow \gamma f_0(1710) \rightarrow \gamma\pi\pi)}{Br(J/\psi \rightarrow \gamma f_0(1710) \rightarrow \gamma\pi\pi)} Br(J/\psi \rightarrow \gamma f_0(1710)) = (4.1 \pm 1.2) \times 10^{-5}, \quad (6)$$

$$Br(\psi(2S) \rightarrow \gamma f_0(1710)) = \frac{Br(\psi(2S) \rightarrow \gamma f_0(1710) \rightarrow \gamma K\bar{K})}{Br(J/\psi \rightarrow \gamma f_0(1710) \rightarrow \gamma K\bar{K})} Br(J/\psi \rightarrow \gamma f_0(1710)) = (3.1 \pm 0.7) \times 10^{-5}, \quad (7)$$

$$Br(\Upsilon(1S) \rightarrow \gamma f_0(1710)) = \frac{Br(\Upsilon(1S) \rightarrow \gamma f_0(1710) \rightarrow \gamma\pi\pi)}{Br(J/\psi \rightarrow \gamma f_0(1710) \rightarrow \gamma\pi\pi)} Br(J/\psi \rightarrow \gamma f_0(1710)) = (0.93 \pm 0.27) \times 10^{-5}, \quad (8)$$

$$Br(\Upsilon(1S) \rightarrow \gamma f_0(1710)) = \frac{Br(\Upsilon(1S) \rightarrow \gamma f_0(1710) \rightarrow \gamma K\bar{K})}{Br(J/\psi \rightarrow \gamma f_0(1710) \rightarrow \gamma K\bar{K})} Br(J/\psi \rightarrow \gamma f_0(1710)) = (1.03 \pm 0.19) \times 10^{-5}. \quad (9)$$

Свойства резонанса $f_0(1710)$ и его возможная природа уже несколько десятилетий являются предметом интенсивных дискуссий, см. обзоры [2, 3] и ссылки в них. На сегодняшний день численные оценки, указанные в табл. 1, представляют собой неплохое дополнение к имеющимся весьма скудным сведениям об абсолютных долях распада $f_0(1710)$, см. раздел в RPP [2], посвященный этому состоянию (существующие данные не используются Particle Data Group для нахождения средних или подгоночных значений, пределов и т.д.). Утверждения, подобные “seen”, в этом разделе могут быть заменены соответствующими значениями из табл. 1.

Подобный способ оценки абсолютных долей распадов может оказаться полезным и для других тяжелых скалярных (тензорных) многоканальных резонансов, например, для $f_0(1370)$, $f_0(1500)$, $f_0(1770)$ и $f_0(2020)$, которые могут рождаться как в πN -столкновениях за счет механизма однопионного обмена, так и в радиационных распадах J/ψ , $\psi(2S)$ и $\Upsilon(1S)$.

В недавней работе [4] мы обсуждали свойства нового мезона $a_0(1700/1800)$ [2], предполагая что он может быть похож на $q^2\bar{q}^2$ -состояние из МПТ-мешка [5]. У этого a_0 -мезона должен быть изоскалярный партнер f_0 с близкой (или даже вырожденной) массой [5]. Доли распадов в табл. 1 помогут понять, может ли $f_0(1710)$ претендовать на эту роль. Этот вопрос будет рассмотрен отдельно.

Работа выполнена в рамках государственного задания Института математики им. С. Л. Соболева СО РАН, проект # FWNF-2022-0021.

-
1. V. A. Dorofeev, D. R. Eremeev, V. G. Gotmam et al. (VES Collaboration), arXiv:2306.07779.
 2. R. L. Workman, V. D. Burket, V. Crede et al. (Particle Data Group), Prog. Theor. Exp. Phys. **2022**, 083C01 (2022) and 2023 update.
 3. E. Klempt and A. Zaitsev, Phys. Rep. **454**, 1 (2007).
 4. N. N. Achasov and G. N. Shestakov, Phys. Rev. D **108**, 036018 (2023).
 5. R. L. Jaffe, Phys. Rev. D **15**, 267 (1977).

Система спин-флипа протонов на базе корректирующих диполей Нуклотрона/ОИЯИ на спиновом резонансе $\gamma G = 7$

Ю. Н. Филатов^{+∇1)}, А. М. Кондратенко^{+*}, Н. Н. Николаев^{+×}, Ю. В. Сеничев^{+°}, М. А. Кондратенко^{+*},
С. В. Виноградов⁺, Е. Д. Цыплаков⁺, А. В. Бутенко[∇], С. А. Костромин[∇], В. П. Ладыгин[∇], Е. М. Сыресин[∇],
И. Л. Гурылева^{+∇}, А. А. Мельников^{°×}, А. Е. Аксентьев^{+°}

⁺Московский физико-технический институт, 141701 Долгопрудный, Россия

^{*}Научно-техническая лаборатория “Заряд”, 630090 Новосибирск, Россия

[×]Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН, 142432 Черноголовка, Россия

[°]Институт ядерных исследований РАН, 108840 Троицк, Москва, Россия

[∇]Объединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Россия

Поступила в редакцию 20 августа 2023 г.

После переработки 20 августа 2023 г.

Принята к публикации 22 августа 2023 г.

Предложена система спин-флипа, обеспечивающая многократные перевороты поляризации протонов в режиме спиновой прозрачности в сверхпроводящем синхротроне Нуклотрон при импульсе пучка 3.54 ГэВ/с, соответствующему целочисленному спиновому резонансу $\gamma G = 7$. Управление спином частиц осуществляется навигатором на основе штатных корректирующих диполей. Приведены результаты численного моделирования спиновой динамики протонов в режимах спин-флипа и адиабатического захвата поляризации протонов навигатором при доставке пучка в область резонанса $\gamma G = 7$. Обсуждается возможность экспериментальной проверки системы спин-флипа протонов в Нуклотроне. Для проведения пилотного эксперимента предложена схема сохранения поляризации протонов до импульса 3.54 ГэВ/с с помощью преднамеренного увеличения мощностей целочисленных спиновых резонансов за счет контролируемого отклонения замкнутой орбиты корректирующими диполями в процессе ускорения пучка.

DOI: 10.31857/S1234567823180027, EDN: wpjsw

Введение. Контролируемое вращение поляризации пучков частиц в накопителях и коллайдерах является критической компонентой поляризационных экспериментов по разгадке спинового кризиса в глубоконеупругом рассеянии [1], тонким спиновым явлениям в жестких процессах [2, 3] и проверкам фундаментальных симметрий [4] как на современных, так и планируемых накопителях и коллайдерах, таких как NICA (Nuclotron based Ion Collider fAcility, Объединенный Институт Ядерных Исследований, г. Дубна) [5, 6] и EIC (Electron-Ion Collider, Brookhaven National Laboratory, USA) [7]. Вместе с тем, возможность накопления пучков с отличной от вертикальной поляризацией далека от решения, в особенности для поляризованных дейтронов в точке встречи пучков в коллайдере. В связи с этим особенно привлекательна работа в так называемом режиме спиновой прозрачности (ST режиме), предложенном в работах [8, 9]. В частности, для разгадки спинового

кризиса императивно глубоконеупругое рассеяние на поляризованных нейтронах, и в роли нейтронов можно использовать или дейтроны, или ^3He [10]. Опыт накопления поляризованного ^3He высокой энергии отсутствует, однако для контроля поляризации ^3He можно использовать аналогичные методы, апробированные на поляризованных протонах [11]. Для работы на EIC с поляризованными дейтронами единственно реалистической представляется техника спиновой прозрачности [12].

Именно ST режим рассматривается как базисный для экспериментов с поляризованными протонами и дейтронами в ускорительном комплексе NICA [13]. В этом уникальном режиме рабочая точка выбирается в окрестности целочисленного (целого) спинового резонанса со стабилизацией требуемой ориентации поляризации в точке взаимодействия и ее управлением спиновыми навигаторами – устройствами на базе слабых магнитных полей, которые практически не изменяют орбитальных характеристик пучка при манипуляциях направлением поляризации [14]. До-

¹⁾e-mail: filatov.iun@mipt.ru

стоинством ST режима является возможность реализации системы спин-флипа (SF-системы), позволяющей осуществлять многократные перевороты спинов во время проведения эксперимента, что приводит к значительному уменьшению систематических ошибок полученных экспериментальных данных [15–17].

В экспериментально проверенных SF-системах, основанных на пересечении индуцированного спинового резонанса с помощью RF-магнитов [18], принципиально происходит, хоть и незначительная, деполяризация при каждом перевороте спина, что в итоге ограничивает максимальное число переворотов поляризации. Так, в коллайдере RHIC при использовании такой SF-системы на RF-диполях была экспериментально продемонстрирована высокая эффективность переворота спинов на уровне 97% в диапазоне энергий от 24 до 255 ГэВ [19], чему соответствует максимальное допустимое число переворотов спина во время эксперимента порядка нескольких десятков. Особенностью системы спин-флипа в ST режиме является отсутствие резонансной деполяризации пучка, которая исключается за счет стабилизации спиновой частоты навигатором в процессе переворотов спина. В результате исключается сама возможность пересечения целочисленного спинового резонанса.

Для протонов в диапазоне импульсов до 3 ГэВ/с рассматривалась возможность экспериментальной проверки ST режима на целых спиновых резонансах в Нуклотроне, который является инжектором поляризованных протонов и дейтронов в коллайдер NICA [20, 12]. Была предложена и промоделирована представляющаяся оптимальной на низких энергиях SF-система протонов на базе спинового навигатора, реализованного с помощью двух слабых соленоидов [17]. Навигаторные соленоиды с интегралом поля до 0.3 Тл·м, помимо управления поляризацией протонов, позволяют обеспечить адиабатическое пересечение целых резонансов с сохранением поляризации в процессе ускорения пучка до импульса 3 ГэВ/с [21]. Однако для выполнения таких экспериментов требуется заметная модернизация Нуклотрона для введения навигаторных соленоидов в структуру синхротрона, который в настоящее время используется как инжектор релятивистских ядер в коллайдер NICA для выполнения первоочередной программы исследований в детекторе MPD (Multi-Purpose Detector) [22].

Ввиду насущности экспериментальной проверки принципа ST, в работе [23] был предложен принципиально новый спиновый навигатор, который не использует дополнительные магнитные поля, а со-

здается на основе имеющихся в магнитной структуре Нуклотрона штатных корректирующих диполей. Идея такого навигатора основана на интерференционном усилении действия корректирующих диполей на спин за счет возникновения дополнительных полей на возмущенной замкнутой орбите. При низких энергиях возмущение орбиты и навигаторная частота ограничиваются апертурой камеры Нуклотрона, но апертурные ограничения снимаются с ростом энергии. При этом растет и действие навигатора на спиновую динамику. В отличие от продольных полей требуемые интегралы дипольных навигаторных полей не растут с энергией при фиксированном значении навигаторной частоты.

Оптимальным для проведения эксперимента по проверке ST режима с навигаторными диполями представляется импульс пучка 3.54 ГэВ/с, соответствующий целому спиновому резонансу $\gamma G = 7$ (здесь G – аномальная часть гиромагнитного отношения, γ – релятивистский фактор). При таком импульсе и значении нормализованной вертикальной бетатронной частоты ν_y в диапазоне от 7 до 8 все еще исключается пересечение опасного внутреннего спинового резонанса $\gamma G = \nu_y$ [21].

Для проведения пилотного эксперимента в Нуклотроне по тестированию SF-системы протонов необходимо решение ряда задач в неисследованном ранее режиме ST:

- разработать SF-систему протонов на базе корректирующих диполей Нуклотрона;
- сохранить поляризацию при ускорении протонов до 3.54 ГэВ/с с помощью корректирующих диполей;
- обеспечить адиабатический захват поляризации протонов навигатором в область целого спинового резонанса $\gamma G = 7$.

Последовательный анализ этого круга новых задач спиновой динамики является темой этой работы. Сформулированные требования на параметры штатных корректирующих диполей для навигации спинов протонов в Нуклотроне найдут приложения и для управления поляризацией протонов в коллайдере NICA.

SF-система протонов на базе корректирующих диполей.

Спиновый навигатор для $\gamma G = 7$. Методика расчета спиновых навигаторов на базе корректирующих диполей Нуклотрона приведена в работах [23, 24]. Корректирующие диполи индуцируют навигаторное поле $\mathbf{h}_{\text{нав}}$, которое является периодической функцией координаты z вдоль расчетной замкнутой орбиты.

Навигаторное поле определяет в точке наблюдения повторяющееся от оборота к обороту направление поляризации $\mathbf{n}$, вокруг которого спины вращаются с навигаторной частотой ν_{nav}

$$\mathbf{h}_{\text{nav}}(z) = \nu_{\text{nav}} \mathbf{n}(z). \quad (1)$$

Спины частиц, направленные вдоль оси навигатора $\mathbf{n}$, будут совершать устойчивое периодическое движение, в то время как спины частиц, направленные поперечно к оси навигатора, будут размешиваться из-за разброса навигаторной частоты и частот орбитального движения.

В Нуклотроне с вертикальным полем в арочных диполях вклад в итоговое навигаторное поле будут давать только корректирующие диполи с радиальными полями в количестве N_{dip} [23]:

$$\mathbf{h}_{\text{nav}}(z) = \sum_{i=1}^{N_{\text{dip}}} \mathbf{h}_i(z) = \sum_{i=1}^{N_{\text{dip}}} \nu_i \mathbf{n}_i(z), \quad (2)$$

где вклад в парциальные поля $\mathbf{h}_i$ от каждого i -ого диполя с радиальным полем $b_{x,i}$ длиной L , расположенного в месте с координатой z_i , определяется периодической спиновой функцией отклика $\mathbf{F}_x$ для режима спиновой прозрачности [25, 26]:

$$\nu_i = \frac{|\mathbf{F}_x(z_i)| b_{x,i} L}{2\pi B\rho}, \quad \mathbf{n}_i(z) = \sum_{j=1}^3 \frac{F_{xj}(z_i)}{|\mathbf{F}_x(z_i)|} \mathbf{s}_j(z). \quad (3)$$

Здесь $B\rho$ – магнитная жесткость, $\mathbf{s}_j$ – единичные орты спиновой системы координат, которые в начале координат совпадают с ортами ускорительной системы [27]. При движении частицы по расчетной орбите спиновые орты $\mathbf{s}_j(z)$ воспроизводят динамику спинов, изначально направленных вдоль радиального $\mathbf{e}_x$, вертикального $\mathbf{e}_y$ и продольного $\mathbf{e}_z$ направлений. Функция отклика учитывает кроме прямого действия на спин радиального поля корректора, также и дополнительное действие полей, возникающих на искаженной этим корректором замкнутой орбите.

Рассмотрим задачу о получении требуемого направления поляризации с помощью спинового навигатора в детекторе, расположенного, например, в начале координат. Компоненты парциальных осей навигатора от i -ого корректора будут иметь вид

$$\mathbf{n}_i(0) = \frac{F_{x1}(z_i) \mathbf{e}_x + F_{x2}(z_i) \mathbf{e}_y + F_{x3}(z_i) \mathbf{e}_z}{|\mathbf{F}_x(z_i)|}. \quad (4)$$

На рисунке 1 приведена зависимость компонент радиальной функции отклика $\mathbf{F}_x$ протонов от координаты z в Нуклотроне для $\gamma G = 7$. В Нуклотроне

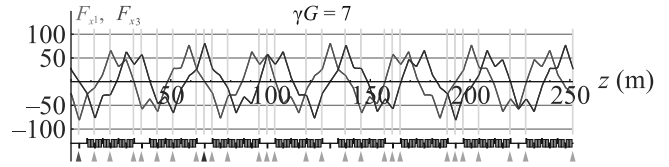


Рис. 1. (Цветной онлайн) Компоненты функции отклика для протонов в Нуклотроне

вертикальная компонента функции отклика отсутствует ($F_{x2} = 0$) [23]. Сплошная красная и пунктирная синяя линии соответствуют радиальной F_{x1} и продольной F_{x3} компонентам функции отклика. Также на рис. 1 показана структура Нуклотрона: зелеными прямоугольниками обозначены арочные диполи. Места расположения корректоров указаны треугольниками под структурой Нуклотрона.

Для реализации спинового навигатора целесообразно выбрать 1-й и 9-й корректоры, обозначенные соответственно красным и синим треугольниками. С одной стороны, в местах их размещения модуль функции отклика максимален. С другой – в месте расположения 1-го корректора отсутствует компонента F_{x3} , т.е. 1-й корректор (обозначен красным треугольником) будет индуцировать радиальное навигаторное поле в начале координат. Аналогично, 9-й корректор (синий треугольник) индуцирует продольное навигаторное поле ($F_{x1}(z_9) = 0$). Таким образом, варьируя поля этих корректоров, можно одновременно задавать навигаторную частоту и требуемое направление поляризации в детекторе:

$$\nu_{\text{nav}} = |\mathbf{h}_{\text{nav}}| = \frac{\sqrt{b_{x1}^2 |\mathbf{F}_x(z_1)|^2 + b_{x9}^2 |\mathbf{F}_x(z_9)|^2} L}{2\pi B\rho}, \quad (5)$$

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{h}_{\text{nav}}}{|\mathbf{h}_{\text{nav}}|} = \frac{b_{x1} F_{x1}(z_1) \mathbf{e}_x + b_{x9} F_{x3}(z_9) \mathbf{e}_z}{\sqrt{b_{x1}^2 |\mathbf{F}_x(z_1)|^2 + b_{x9}^2 |\mathbf{F}_x(z_9)|^2}}, \quad (6)$$

где $|\mathbf{F}_x(z_1)| \approx |\mathbf{F}_x(z_9)| \approx 80$.

Для стабилизации спинового движения необходимо, чтобы действие навигатора на спин значительно превосходило действие возмущающих магнитных полей, вызванных несовершенством изготовления и выставки магнитных элементов Нуклотрона, а также бетатронными колебаниями, т.е. навигаторная частота должна значительно превосходить мощность резонанса $\gamma G = 7$ [8]

$$\nu_{\text{nav}} \gg \omega. \quad (7)$$

Дополнительно, для подавления действия на спин синхротронных колебаний необходимо выполнить условие [23, 28]:

$$\nu_{\text{nav}} \gg \max(\sigma, \nu_\gamma), \quad (8)$$

где $\sigma = G\Delta\gamma$ – амплитуда синхротронной модуляции спиновой частоты, ν_γ – частота синхротронных колебаний в единицах частоты обращения частицы Ω_0 , которые для $\gamma G = 7$ при ускоряющем напряжении $V_{\text{rf}} = 10$ кВ и кратности ускорения $q = 5$ равны $\sigma \approx 1.4 \cdot 10^{-3}$ и $\nu_\gamma \approx 4.3 \cdot 10^{-4}$.

Мощность резонанса в Нуклотроне в основном связана с неточностью выставки квадруполь и для $\gamma G = 7$ при среднеквадратичном искажении замкнутой орбиты до 1 мм, достигнутое путем коррекции орбиты реальной структуры, составляет $\omega \approx 4 \cdot 10^{-3}$. Таким образом, значение навигаторной частоты, равное $\nu_{\text{nav}} = 0.02$, достаточно для управления поляризацией протонов.

На рисунке 2 приведены графики отклонения замкнутой орбиты при стабилизации радиальной (сплошная линия) и продольной (пунктирная линия) поляризации протонов в начале координат спиновым навигатором с частотой $\nu_{\text{nav}} = 0.02$. Требуемый интеграл радиального поля в корректирующем диполе для обеспечения указанной частоты навигатора составляет примерно 20 мТл·м. Максимальное отклонение замкнутой орбиты от расчетной в обоих случаях не превышает 10 мм.

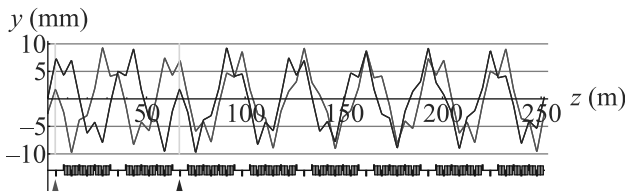


Рис. 2. (Цветной онлайн) Искривление замкнутой орбиты при стабилизации радиальной и продольной поляризации при $\gamma G = 7$

SF-система без резонансной деполаризации. Представленный спиновый навигатор позволяет совершать адиабатические перевороты спинов с помощью навигаторных диполей. В процессе манипуляций направлением поляризации (n -оси) во время эксперимента необходимо, чтобы изменение полей навигаторных диполей было адиабатическим [17]:

$$\left| \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial b_{x1}} \frac{db_{x1}}{dt} \right| \ll \nu_{\text{nav}} \Omega_0, \quad \left| \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial b_{x9}} \frac{db_{x9}}{dt} \right| \ll \nu_{\text{nav}} \Omega_0. \quad (9)$$

Во время переворотов спина можно исключить деполаризацию пучка, связанную с пересечениями спиновых резонансов, поддерживая значение навигаторной частоты ν_{nav} постоянной [8]. Для этого необходимо, чтобы поля навигаторных диполей лежали

на эллипсе при различных ориентациях поляризации:

$$\frac{b_{x1}^2}{B_1^2} + \frac{b_{x9}^2}{B_9^2} = 1, \quad B_1 = \frac{2\pi\nu_{\text{nav}}B\rho}{|\mathbf{F}_x(z_1)|L}, \quad B_9 = \frac{2\pi\nu_{\text{nav}}B\rho}{|\mathbf{F}_x(z_9)|L}. \quad (10)$$

На рисунке 3 показана связь полей b_{x1} и b_{x9} навигаторных диполей для стабилизации навигаторной частоты при изменении направления поляризации.

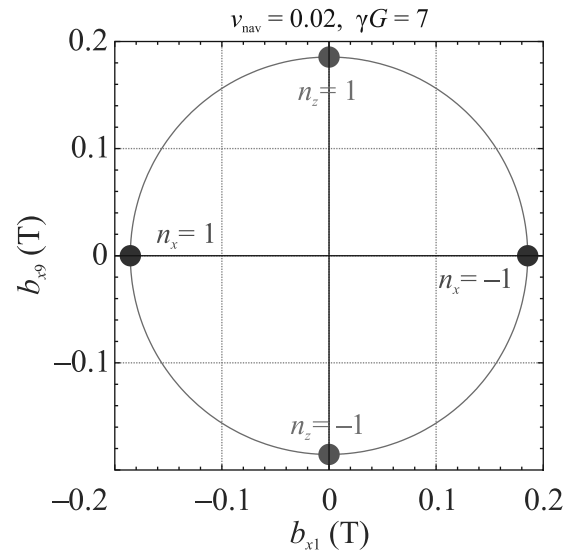


Рис. 3. (Цветной онлайн) Связь полей навигаторных диполей для стабилизации навигаторной частоты

Красными точками отмечены поля корректоров, для которых поляризация имеет продольное направление, а синими точками, – когда поляризация имеет радиальное направление.

Условие адиабатического захвата при организации SF-системы через время переворота спина τ запишется в виде [17]:

$$\tau \gg T/\nu_{\text{nav}}, \quad (11)$$

где T – период обращения частицы. При $\nu_{\text{nav}} = 0.02$ время переворота спина должно быть $\tau \sim 1$ мс, чему соответствует 10^3 оборотов частицы.

Моделирование SF-системы для $\gamma G = 7$. Приведем результаты численного моделирования спиновой динамики при организации SF-системы на целом резонансе $\gamma G = 7$, выполненного с помощью спинтрекинг кода Zgoubi [29].

На рисунке 4 показан график зависимости продольной и радиальной компонент спина от числа оборотов частицы во время двух переворотов спина. Навигаторная частота во время изменения направления спина поддерживалась постоянной и равной

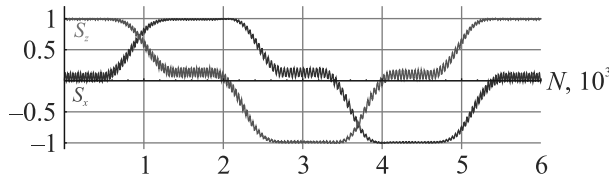


Рис. 4. (Цветной онлайн) Адиабатические перевороты спина протона в Нуклотроне с помощью навигаторных корректоров

$\nu_{\text{нав}} = 0.02$. Спин совершает переворот примерно за 10^3 оборотов, что обеспечивает адиабатический характер динамики спина в процессе переворота.

Спин последовательно следует за полем навигатора, начиная от продольного направления ($\mathbf{S} = \mathbf{e}_z$) к радиальному ($\mathbf{S} = \mathbf{e}_x$) и затем снова к продольному ($\mathbf{S} = -\mathbf{e}_z$) и радиальному ($\mathbf{S} = -\mathbf{e}_x$) направлениям с обратными знаками.

В расчетах учтены ошибки юстировки квадруполь, которые приводили к искажению замкнутой орбиты (см. рис. 5). Поперечное отклонение искаженной орбиты $r_{\perp}$ от расчетной в среднем составляет около 1 мм, а максимальное отклонение не превышает 3 мм. Также полагалось, что нормализованные эмиттансы бетатронных колебаний составляли $\epsilon_{x,y} = 4\pi \text{ мм} \cdot \text{мрад}$, а параметры синхротронных колебаний соответствуют значениям $V_{\text{rf}} = 10 \text{ кВ}$, $q = 5$ (фаза синхронной частицы равна нулю).

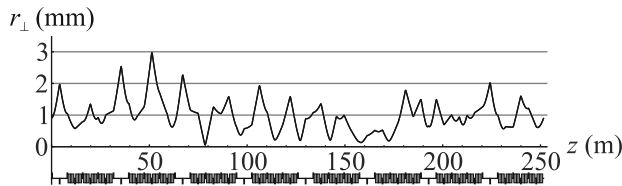


Рис. 5. (Цветной онлайн) Отклонение искаженной замкнутой орбиты, вызванное ошибками выставки квадруполь

Отметим, в процессе переворота спина происходит контролируемое изменение замкнутой орбиты навигаторными корректорами, что приводит к смещению замкнутой орбиты в месте расположения детектора в вертикальной плоскости Нуклотрона, как показано на рис. 6. Сдвиг замкнутой орбиты в вертикальном направлении при переворотах спинов с продольной ориентацией составляет около 0.5 мм и примерно 5.5 мм для спинов с радиальной ориентацией.

Представленные расчеты показывают, что навигатор с частотой $\nu_{\text{нав}} = 0.02$ позволяет осуществлять перевороты спинов протонов примерно за 1 миллисекунду. Однако на практике время переворота спи-

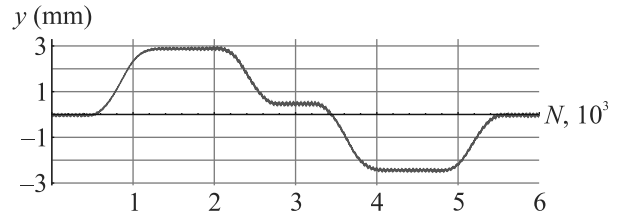


Рис. 6. (Цветной онлайн) Сдвиг замкнутой орбиты в вертикальном направлении во время переворотов спина протона

нов будет ограничено скоростью изменения радиального поля в сверхпроводящих корректорах, которая составляет $\sim 1 \text{ Тл/с}$ [30]. В этом случае время переворота спина составит $\sim 0.1 \text{ с}$. Таким образом, в Нуклотроне с сверхпроводящими корректирующими диполями условие адиабатического захвата спинов навигатором во время спин-флипов будет заведомо выполнено.

Сохранение поляризации протонов. Деполяризация пучка при ускорении протонов в Нуклотроне до 3.54 ГэВ/с в основном связана с пересечением целых резонансов, мощности которых растут с энергией пучка [21]. Мощности целых резонансов связаны с искажением замкнутой орбиты, вызванной ошибками выставки магнитных элементов, и растут пропорционально ее отклонению.

Результат пересечения целого резонанса $\gamma G = k$ определяется нормализованной скоростью изменения отстройки от резонанса ϵ' в момент его пересечения, которая вычисляется через темп подъема поля:

$$\epsilon' = R \frac{d\epsilon}{dz} = \frac{eGR\rho}{mc^3} \left(\frac{dB}{dt} \right), \quad \epsilon = \gamma G - k, \quad (12)$$

где $2\pi R$ – длина расчетной орбиты, ρ – радиус орбиты в арочных диполях, ϵ – отстройка от резонанса. В Нуклотроне $R \approx 40 \text{ м}$, $\rho \approx 22 \text{ м}$ и при темпе подъема поля $dB/dt = 0.6 \text{ Тл/с}$ скорость пересечения становится равной $\epsilon' \approx 10^{-6}$.

Изменение вертикальной компоненты спина после пересечения резонанса определяется формулой Фруассара–Стора [31]

$$S_y^{\text{after}} = \left(-1 + 2 \exp \left(-\frac{\pi \omega^2}{2 \epsilon'} \right) \right) S_y^{\text{before}}. \quad (13)$$

При быстром пересечении ($\epsilon' \gg \omega^2$) вертикальная проекция спина практически не изменяется. При медленном пересечении ($\epsilon' \ll \omega^2$) спин адиабатически переворачивается. Опасными являются резонансы с промежуточным пересечением ($\epsilon' \sim \omega^2$), когда происходит существенная потеря поляризации.

В таблице 1 приведены значения мощностей целых резонансов и степени деполаризации пучка после пересечения каждого резонанса при условии, что до пересечения резонанса пучок был полностью поляризован: $D = 1 - |S_y^{\text{after}}|$. При расчетах полагалось, что среднеквадратичное искажение орбиты, вызванное несовершенством структуры синхротрона, составляет 1 мм, скорость подъема поля равна 0.6 Тл/с.

Таблица 1. Пересечение целых спиновых резонансов в Нуклотроне

$\gamma G = k$	2	3	4	5	6
pc , ГэВ	0.46	1.26	1.87	2.44	3.00
ω , 10^{-4}	0.24	0.59	1.32	2.96	7.51
D , %	0.2	1.1	5.2	25	85

Расчеты показывают, что первые два резонанса $\gamma G = 2$ и $\gamma G = 3$ пересекаются быстро. Пересечение резонанса $\gamma G = 4$ приводит к 5 % деполаризации пучка. Значительная деполаризация пучка происходит при пересечении резонансов $\gamma G = 5$ и $\gamma G = 6$.

Поляризацию пучка в Нуклотроне можно сохранить, обеспечив адиабатическое пересечение резонансов с номерами $\gamma G = 4, 5, 6$ за счет преднамеренного увеличения мощности этих резонансов корректирующими диполями. Контролируемое возбуждение замкнутой орбиты нужно осуществлять после быстрого пересечения первых двух резонансов.

Приведем результаты численного моделирования процесса ускорения протона, выполненные с помощью Zgoubi. На рисунке 7 показано изменение вертикальной проекции спина от γG , связанное с пересечением целых резонансов, при ускорении протона до $\gamma G \approx 6.5$. Частица запускалась вдоль искаженной замкнутой орбиты, вызванной такими же ошибками выставки квадрупольей, как и в случае моделирования SF-системы (см. рис. 5).

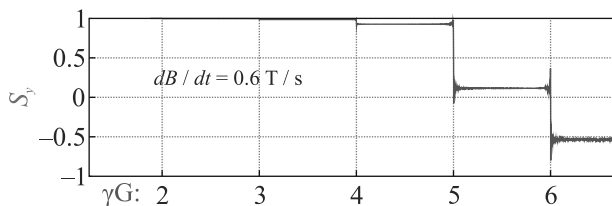


Рис. 7. (Цветной онлайн) Ускорение вертикально поляризованного протона в Нуклотроне

Характер пересечения целых резонансов для конкретно взятой выборки сдвигов квадрупольей соответствует данным статистической модели (см. табл. 1): первые два резонанса пересекаются быстро, на резонансе $\gamma G = 4$ теряется примерно 6 % поляризации, в то время как на последних двух

резонансах происходит значительное отклонение направления спина от вертикали.

На рисунке 8 показан результат моделирования сохранения поляризации протонов за счет корректирующих диполей. Амплитуда ускоряющего напряжения, кратность ускорения, поперечные эмиттансы, а также ошибки выставки квадрупольей выбраны такими же, как и при моделировании SF-системы.

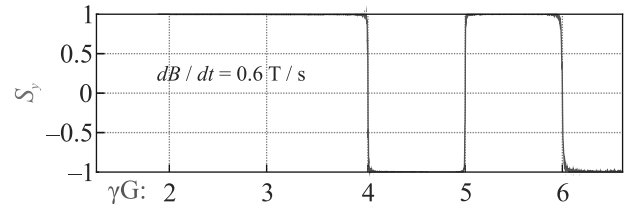


Рис. 8. (Цветной онлайн) Сохранение поляризации протонов в Нуклотроне

Замкнутая орбита возбуждалась плавным включением корректоров с номерами 1, 5, 9, 20 на участке “энергии” γG от 3.3 до 3.7 и далее поддерживалась постоянной, чтобы преднамеренно увеличить мощности целых резонансов $\gamma G = 4, 5, 6$. Максимальное отклонение орбиты составляло 15 мм при максимальном значении полей в корректирующих диполях $b_{x1} = -b_{x5} = b_{x9} = -b_{x20} = 0.2$ Тл на $\gamma G = 6.5$.

Расчеты показывают, что корректирующие диполи обеспечивают сохранение поляризации при ускорении протонов до 3.54 ГэВ/с: первые два резонанса пересекаются быстро без изменения вертикальной проекции спина, а остальные резонансы пересекаются медленно с адиабатическим переворотом спина на каждом резонансе.

Адиабатический захват поляризации протонов. Кроме сохранения поляризации при ускорении протонов до энергии эксперимента, необходимо согласовать направления поляризации пучка и спинового поля, индуцированного навигатором. Вдали от целого спинового резонанса n -ось поляризации определяется ародными диполями и направлена вертикально. В точке резонанса n -ось задается полем спинового навигатора и лежит в плоскости синхротрона. Согласование направления поляризации автоматически достигается в случае адиабатического входа в область резонанса $\gamma G = 7$.

Для адиабатической доставки пучка в область целого резонанса, кроме выполнения условия (8), необходимо выполнить дополнительное условие на темп подъема средней энергии γmc^2 пучка [17]:

$$\frac{d\gamma}{dt} \ll \frac{\Omega_0}{G} \nu_{\text{nav}}^2. \quad (14)$$

В этом случае спин, ориентированный вертикально вдали от резонанса, адиабатически наклоняется в

плоскость синхротрона до тех пор, пока не выстроится вдоль поля, индуцированного спиновым навигатором. При медленном приближении к резонансу степень поляризации пучка сохраняется с высокой точностью – навигатор адиабатически захватывает поляризацию, обеспечивая стабильную прецессию спинов вокруг спинового поля навигатора.

В другом предельном случае, когда резонанс достигается быстро, спины частиц не успевают изменить свою ориентацию и остаются вертикальными, т.е. поперечными к спинового полю навигатора в резонансе $\gamma G = 7$. В результате поляризация будет утеряна из-за разброса спиновой частоты.

На рисунке 9 приведены результаты численного моделирования адиабатического захвата поляризации протонов навигатором при доставке пучка в область резонанса $\gamma G = 7$, выполненные с помощью Zgoubi. Навигатор стабилизировал радиальное направление поляризации в детекторе с помощью 1-го корректора. Поперечные эмиттансы, энергетический разброс, частота синхротронных колебаний, а также ошибки выставки квадрупольных выбирались такими же, как и при моделировании SF-системы и процесса ускорения поляризованных протонов.

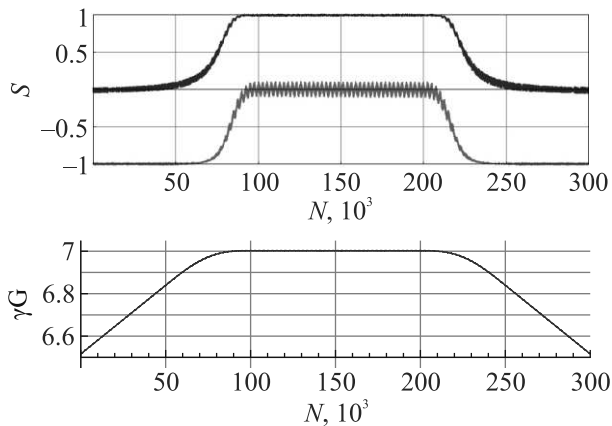


Рис. 9. (Цветной онлайн) Адиабатический захват навигатором поляризации протонов в область резонанса $\gamma G = 7$

Изначально полагалось, что перед адиабатическим захватом поляризации выполнены следующие процедуры. Поляризация протонов сохранена с помощью корректирующих диполей до $\gamma G \sim 6.5$, и спин направлен против вертикального направления. После ускорения три из четырех корректоров с номерами 5, 9 и 20, используемых для преднамеренного увеличения мощностей резонансов, медленно выключаются, а 1-й навигаторный корректор остается включенным для поддержания навигаторной частоты, равной $\nu_{\text{nav}} = 0.02$.

При начальном темпе подъема поля 0.6 Тл/с условие (14) выполнено, и спин адиабатически выстраивается вдоль радиального направления по мере приближения к резонансу $\gamma G = 7$. Далее, на интервале от 80 до 220 тысяч оборотов спин стабилизируется навигатором в радиальном направлении в ST режиме. Чтобы убедиться в адиабатическом характере динамики спина при захвате поляризации навигатором, на рис. 9 показан участок ($N > 220$ тысяч оборотов) с медленным выходом из области резонанса в исходную точку $\gamma G = 6.5$ с восстановлением начального направления спина без потери поляризации.

Выводы. Предложенные на базе штатных корректирующих диполей система спин-флипа, система адиабатического захвата поляризации навигатором, а также схема сохранения поляризации при ускорении пучка протонов позволят провести при существующем оснащении Нуклотрона экспериментальную проверку принципа спиновой прозрачности на резонансе $\gamma G = 7$. Измерение поляризации протонов можно проводить на имеющихся на ускорительном комплексе Нуклотрон-ОИЯИ поляриметрах как на внутренней мишени [32, 33], так и на выведенном пучке [34].

Успешное сохранение поляризации протонов с импульсом до 3.54 ГэВ/с позволит проводить как эксперименты с поляризованными протонами на внешних мишенях, так и использовать Нуклотрон без введения в него дополнительных магнитных элементов в качестве быстроциклирующего инжектора поляризованных протонов в коллайдер NICA. Последнее есть неотъемлемое требование в программе спиновой физики для формирования высокоинтенсивных поляризованных пучков протонов в комплексе NICA [35, 36].

Результаты анализа спиновой динамики вблизи целочисленных резонансов актуальны также для управления поляризацией дейтронов в коллайдере EIC. Представленная система спин-флипа может быть использована в режиме спиновой прозрачности для управления поляризацией протонов и дейтронов на любой энергии в коллайдере NICA с двумя соленоидальными змейками, что позволит проводить высокоточные эксперименты с поляризованными пучками в ускорительном комплексе NICA.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда # 22-42-04419, <https://rscf.ru/project/22-42-04419/>.

1. N. J. Abdulameer, U. Acharya, A. Adare et al. (PHENIX Collaboration), Phys. Rev. Lett. **130**(25), 251901 (2023).

2. U. A. Acharya, C. Aidala, Y. Akiba et al. (PHENIX Collaboration), *Phys. Rev. D* **105**(3), 032003 (2022).
3. J. Adam, L. Adamczyk, J. R. Adams et al. (STAR Collaboration), *Phys. Rev. D* **103**(9), 092009 (2021).
4. S. Karanth, E. J. Stephenson, S. P. Chang et al. (JEDI Collaboration), *Phys. Rev. X* **13**(3), 031004 (2023).
5. I. A. Savin, A. V. Efremov, D. V. Peshekhonov, A. D. Kovalenko, O. V. Teryaev, O. Yu. Shevchenko, A. P. Nagajcev, A. V. Guskov, V. V. Kukhtin, and N. D. Topilin, *EPJ Web Conf.* **85**, 02039 (2015).
6. V. V. Abramov, A. Aleshko, V. A. Baskov et al. (Collaboration), *PEPAN* **52**(6), 1044 (2021).
7. A. Accardi, J. L. Albacete, M. Anselmino et al. (Collaboration), *Eur. Phys. J. A* **52**, 268 (2016).
8. Y. N. Filatov, A. M. Kondratenko, M. A. Kondratenko, Y. S. Derbenev, and V. S. Morozov, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 194801 (2020).
9. Y. S. Derbenev, Y. N. Filatov, A. M. Kondratenko, M. A. Kondratenko, and V. S. Morozov, *Symmetry* **13**(3), 1 (2021).
10. W. Cosyn, V. Guzey, D. W. Higinbotham, C. Hyde, S. Kuhn, P. Nadel-Turonski, K. Park, M. Sargsian, M. Strikman, and C. Weiss, *J. Phys.: Conf. Ser.* **543**, 012007 (2014).
11. S. Vokal, A. D. Kovalenko, A. M. Kondratenko, M. A. Kondratenko, V. A. Mikhailov, Yu. N. Filatov, and S. S. Shimanskii, *PEPAN* **6**(1), 48 (2009).
12. Y. N. Filatov, A. M. Kondratenko, M. A. Kondratenko, V. V. Vorobyov, S. V. Vinogradov, E. D. Tsyplakov, and V. S. Morozov, *Phys. Rev. Accel. and Beams* **24**(6), 061001 (2021).
13. Yu. N. Filatov, A. D. Kovalenko, A. V. Butenko, E. M. Syresin, V. A. Mikhailov, S. S. Shimanskiy, A. M. Kondratenko, and M. A. Kondratenko, *EPJ Web Conf.* **204**, 10014 (2019).
14. A. D. Kovalenko, A. V. Butenko, V. D. Kekelidze, V. A. Mikhaylov, Y. N. Filatov, A. M. Kondratenko, and M. A. Kondratenko, in *Proc. IPAC2015*, Richmond, VA, USA (2015), p. 2031.
15. Ya. S. Derbenev, A. M. Kondratenko, M. A. Kondratenko, V. S. Morozov, and Yu. N. Filatov, in *Proc. XIV Advanced Research Workshop on HESP (DSPIN-11)*, Dubna (2011), p. 377.
16. A. M. Kondratenko, M. A. Kondratenko, Yu. N. Filatov, V. S. Morozov, Ya. S. Derbenev, F. Lin, and Y. Zhang, in *Proc. NAPAC2016*, Chicago, IL, USA (2016), p. 558.
17. Y. Filatov, A. Kondratenko, M. Kondratenko, V. Vorobyov, S. Vinogradov, E. Tsyplakov, A. Butenko, E. Syresin, S. Kostromin, Y. Derbenev, and V. Morozov, *JINST* **16**(12), P12039 (2021).
18. V. S. Morozov, Z. B. Etienne, M. C. Kandes, A. D. Krisch, M. A. Leonova, D. W. Sivers, V. K. Wong, K. Yonehara, V. A. Anferov, H. O. Meyer, P. Schwandt, E. J. Stephenson, and B. von Przewoski, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 214801 (2003).
19. H. Huang, J. Kewisch, C. Liu, A. Marusic, W. Meng, F. Méot, P. Oddo, V. Ptitsyn, V. Ranjbar, and T. Roser, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 264804 (2018).
20. A. A. Smirnov and A. D. Kovalenko, *Particles and Nuclei, Letters* **1**(6(123)), 11 (2004).
21. Y. N. Filatov, A. V. Butenko, A. M. Kondratenko, M. A. Kondratenko, A. D. Kovalenko, and V. A. Mikhaylov, in *Proc. IPAC2017*, Copenhagen, Denmark (2017), p. 2349.
22. V. D. Kekelidze, A. D. Kovalenko, I. N. Meshkov, A. S. Sorin, and G. V. Trubnikov, *Phys. Atom. Nucl.* **75**, 542 (2012).
23. Yu. N. Filatov, A. M. Kondratenko, M. A. Kondratenko, E. D. Tsyplakov, A. V. Butenko, S. A. Kostromin, V. P. Ladygin, E. M. Syresin, I. L. Guryleva, A. A. Melnikov, and A. E. Aksentyev, *Pis'ma v ZhETF* **116**(7), 411 (2022) [*JETP Lett.* **116**(7), 413 (2022)].
24. Yu. N. Filatov, A. M. Kondratenko, M. A. Kondratenko, Y. S. Derbenev, V. S. Morozov, A. V. Butenko, E. M. Syresin, and E. D. Tsyplakov, *Eur. Phys. J. C* **81**(11), 986 (2021).
25. Yu. N. Filatov, A. M. Kondratenko, M. A. Kondratenko, Ya. S. Derbenev, V. S. Morozov, and A. D. Kovalenko, *Eur. Phys. J. C* **80**, 778 (2020).
26. V. S. Morozov, Y. S. Derbenev, F. Lin, Y. Zhang, Y. N. Filatov, A. M. Kondratenko, and M. A. Kondratenko, in *Proc. of IPAC2018*, Vancouver, BC (2018), p. 400.
27. A. M. Kondratenko, Y. N. Filatov, M. A. Kondratenko, A. D. Kovalenko, and S. V. Vinogradov, *J. Phys.: Conf. Ser.* **1435**, 012037 (2020).
28. Y. S. Derbenev, A. M. Kondratenko, and A. N. Skrinskii, *Sov. Phys. JETP* **33**, 658 (1971).
29. F. Méot, *Nucl. Instrum. Methods A* **427**, 353 (1999).
30. A. M. Baldin, N. N. Agapov, N. G. Anishchenko et al. (Collaboration), *IEEE Transactions on Magnetics* **32**(4), 2197 (1996).
31. M. Froissart and R. Stora, *Nucl. Instrum. Methods* **7**(3), 297 (1960).
32. P. K. Kurilkin, V. P. Ladygin, T. Uesaka et al. (Collaboration), *Nucl. Instrum. Methods A* **642**, 45 (2011).
33. A. A. Terekhin, I. S. Volkov, Y. V. Gurchin, A. Y. Isupov, V. P. Ladygin, S. G. Reznikov, A. V. Tishevsky, A. N. Khrenov, and M. Janek, *Phys. Part. Nucl.* **54**(4), 634 (2023).
34. L. S. Azhgirey, V. P. Ladygin, F. Lehar, A. N. Prokofiev, G. D. Stoleto, A. A. Zhdanov, and V. N. Zhmyrov, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **497**, 340 (2003).
35. E. M. Syresin, A. V. Butenko, P. R. Zenkevich, O. S. Kozlov, S. D. Kolokol'chikov, S. A. Kostromin, I. N. Meshkov, N. V. Mityanina, Yu. V. Senichev, A. O. Sidorin, and G. V. Trubnikov, *Phys. Part. Nucl.* **52**, 997 (2021).
36. E. Syresin, A. Butenko, S. Kostromin et al. (Collaboration), in *Proc. IPAC2022*, Bangkok, Thailand (2022), p. 1822.

Генерация третьей гармоники терагерцового излучения в топологических изоляторах на основе халькогенидов висмута и сурьмы

К. А. Кузнецов⁺ 1), П. И. Кузнецов^{*1)}, А. Д. Фролов⁺, А. М. Коновалов⁺, П. М. Ковалева⁺, Г. Х. Китаева⁺

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

^{*} Фрязинский филиал Федерального государственного бюджетного учреждения науки института радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН, 141190 Фрязино, Россия

Поступила в редакцию 21 июля 2023 г.

После переработки 9 августа 2023 г.

Принята к публикации 9 августа 2023 г.

Экспериментально исследована генерация третьей гармоники терагерцового излучения в топологических изоляторах на основе халькогенидов висмута и сурьмы. Обнаружено, что эффективность преобразования в третью гармонику обратно пропорциональна энергии Ферми электронов, при этом лучшим из исследованных материалов по эффективности преобразования является теллурид сурьмы.

DOI: 10.31857/S1234567823180039, EDN: wprnrrg

Введение. Топологически нетривиальные материалы очень перспективны для различных практических приложений терагерцовой (ТГц) фотоники. На поверхности материалов, называемых топологическими изоляторами (ТИ), вследствие сильного спин-орбитального взаимодействия могут существовать безмассовые электроны, топологически защищенные от рассеяния назад [1, 2]. В результате поверхностные состояния в ТИ заполняют всю запрещенную зону объемного материала и остаются металлическими даже в присутствии примесей и поверхностных дефектов. Кроме того, поверхностные носители обладают огромной подвижностью [3]. Помимо использования ТИ в качестве детекторов и генераторов ТГц излучения [4–6], весьма перспективно их применение в качестве высокоэффективных преобразователей частоты ТГц-излучения [7–10]. Ранее генерация высших ТГц гармоник наблюдалась в ряде дираковских материалов: в графене [11, 12], в трехмерном дираковском полуметалле Cd_3As_2 [13]. Генерация третьей ТГц гармоники в ТИ Bi_2Se_3 впервые была экспериментально исследована в [7]. Сравнивая нелинейный ТГц-отклик образцов с нетривиальной (Bi_2Se_3) и тривиальной топологией ($(\text{Bi}_{0.9}\text{In}_{0.1})_2\text{Se}_3$), было показано, что ТГц третья гармоника возникает при наличии поверхностных электронных состояний. Генерация высших ТГц гармоник дираковскими электронами может быть описана с помощью термодинамического механизма нелинейности, зависящего от сверхбыстрой модуля-

ции поглощения. Этот механизм обеспечивается эффективным нагревом и последующим охлаждением электронной системы при взаимодействии с сильными ТГц полями [14]. Таким образом, поведение ТГц высших гармоник связано с характерными временными масштабами динамики носителей дираковских фермионов. В тех случаях, когда охлаждение занимает несколько пикосекунд, это приводит к ярко выраженным эффектам насыщения при увеличении напряженности падающего поля, что недавно наблюдалось в графене при сильном терагерцовом возбуждении [15]. В работе [8] было показано, что сверхбыстрая релаксация поверхностных состояний в ТИ приводит к отсутствию эффектов накопления в течение большой длительности ТГц импульса возбуждения, что приводит к режиму без насыщения, в отличие от графена с сильным насыщением генерации гармоник излучения ТГц диапазона и с длительностью релаксации носителей около нескольких пикосекунд.

В настоящей работе мы измеряли параметры генерации третьей гармоники ТГц излучения в ТИ халькогенидов висмута и сурьмы различных химических составов с продвижением в более высокочастотный диапазон – по сравнению с ранее проведенными нами исследованиями [8, 9]. При этом была изучена эффективность генерации третьей гармоники в зависимости от положения уровня Ферми с целью нахождения наиболее перспективного химического соединения из семейства халькогенидов висмута и сурьмы в качестве нелинейного преобразователя ТГц частоты.

¹⁾e-mail: kirill-spdc@yandex.ru; pik@fireras.ru

1. Исследуемые образцы ТИ.

1.1. Технология роста. В работе исследовались образцы ТИ халькогенидов висмута и сурьмы, описываемых общей химической формулой $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$. Образцы выращивались в горизонтальном кварцевом реакторе при атмосферном давлении водорода методом паровозного осаждения из металлоорганических соединений на сапфировых подложках базовой ориентации (0001) толщиной 400 мкм с буферным слоем ZnTe толщиной 5–20 нм [16]. Триметилвисмут (BiMe_3), триметилсурьму (SbMe_3), диэтилцинк (ZnEt_2), диэтилтеллурид (Et_2Te) и диизопропилселенид (iPr_2Se) были использованы в качестве источников висмута, сурьмы, цинка, теллура и селена. Буферные слои ZnTe выращивались в едином технологическом цикле с пленками ТИ при одной и той же температуре 445 °С. Суммарный поток водорода был равен 1.0 л/мин при осаждении буферных слоев ZnTe и 0.5 л/мин при эпитаксии пленок ТИ. Соотношение элементов пятой и шестой групп VI/V в паровой фазе было не ниже 10, а общее парциальное давление $\text{BiMe}_3 + \text{SbMe}_3$ поддерживалось близким к 6×10^{-5} бар. Стехиометрия и состав пленок установлены по данным рентгеновской энергодисперсионной и рамановской спектроскопии. Рентгеновская дифракция использовалась для подтверждения эпитаксиальной природы выращенных пленок. Для определения элементного состава пленок использовали рентгеновский спектрометр X-MaxN, состыкованный с электронным микроскопом. В результате были выращены и охарактеризованы пленки ТИ бинарных и тройного составов с различной толщиной и типом проводимости (табл. 1). Составы двух образцов (# 1, 2) на композиционно-

Таблица 1. Список исследуемых образцов

Номер образца	Химическая формула	Тип проводимости	Толщина пленки, нм
# 1	Bi_2Se_3	n	30
# 2	$\text{Bi}_2(\text{Te}_{0.44}\text{Se}_{0.66})_3$	n	220
# 3	Bi_2Te_3	p	490
# 4	Sb_2Te_3	p	510

структурной диаграмме $y(x)$ располагались выше кривой Рена [17], поэтому в них преобладала электронная объемная проводимость. Два других образца обладали преимущественно дырочной объемной проводимостью (# 3, 4) с составами ниже кривой Рена.

1.2. Характеризация образцов. Для исследования пропускания образцов ТИ в ТГц диапазоне мы ис-

пользовали традиционную схему терагерцовой спектроскопии временного разрешения (ТСВР) [18]. В качестве ТГц источника для измерений использовалась ТГц фотопроводящая InGaAs-антенна. Напряженность поля ТГц импульсов, пропускаемых через образцы ТИ, измерялась методом электрооптического детектирования в кристалле ZnTe. Функция пропускания $T(f)$ тонкой пленки напрямую связана с ее комплексной проводимостью $G(f)$, и, в соответствии с формулой Тинхама [19, 20], может быть представлена в виде:

$$T(f) = \frac{1+n}{1+n+Z_0 G(f)} e^{i\Phi(f)}. \quad (1)$$

Здесь n – показатель преломления подложки Al_2O_3 , $\Phi(f)$ – фазовый набег, возникающий из-за прохождения тонкой пленки, $Z_0 = 377$ Ом – импеданс вакуума. Полная проводимость может быть представлена как сумма вкладов объемных и поверхностных носителей. Поскольку поверхностный вклад в проводимость значительно меньше, чем объемный, в дальнейшем мы можем рассматривать и изучать только объемную часть проводимости:

$$G(f) \approx G^{\text{bulk}} = \sigma^{\text{bulk}}(f)d, \quad (2)$$

где $\sigma^{\text{bulk}}(f)$ – объемная удельная проводимость, d – толщина пленки. Результаты измерений $\sigma^{\text{bulk}}(f)$ представлены на рис. 1. Резонанс около 1.6 ТГц обусловлен хорошо известным фооном, активным в инфракрасном (ИК) поглощении. Видно, что статическая удельная проводимость максимальна в образцах # 3 и 4, что связано с высокими концентрациями носителей заряда из-за расположения уровня Ферми в валентной зоне. Напротив, в образце # 2, химический состав которого на конфигурационно-структурной диаграмме $y(x)$ характеризуется точкой вблизи кривой Рена, объемная проводимость наиболее сильно подавлена в полном соответствии с результатами работ [17, 21]. В качестве подгоночной функции для соответствия экспериментальным зависимостям на рис. 1 мы использовали сумму трех членов: вклад типа формулы Друде для свободных носителей, вклад Друде–Лоренца для связанных электронов, и вклад всех резонансов с высокими частотами (например, от межзонных переходов), который линейно спадает с частотой:

$$\sigma^{\text{bulk}}(f) \propto \frac{f_{pD}^2}{\gamma_D/2\pi - if} + \frac{f_{pL}^2 \cdot f}{f \cdot \gamma_L/2\pi + i(f_{0L}^2 - f^2)} - if(\varepsilon_\infty - 1), \quad (3)$$

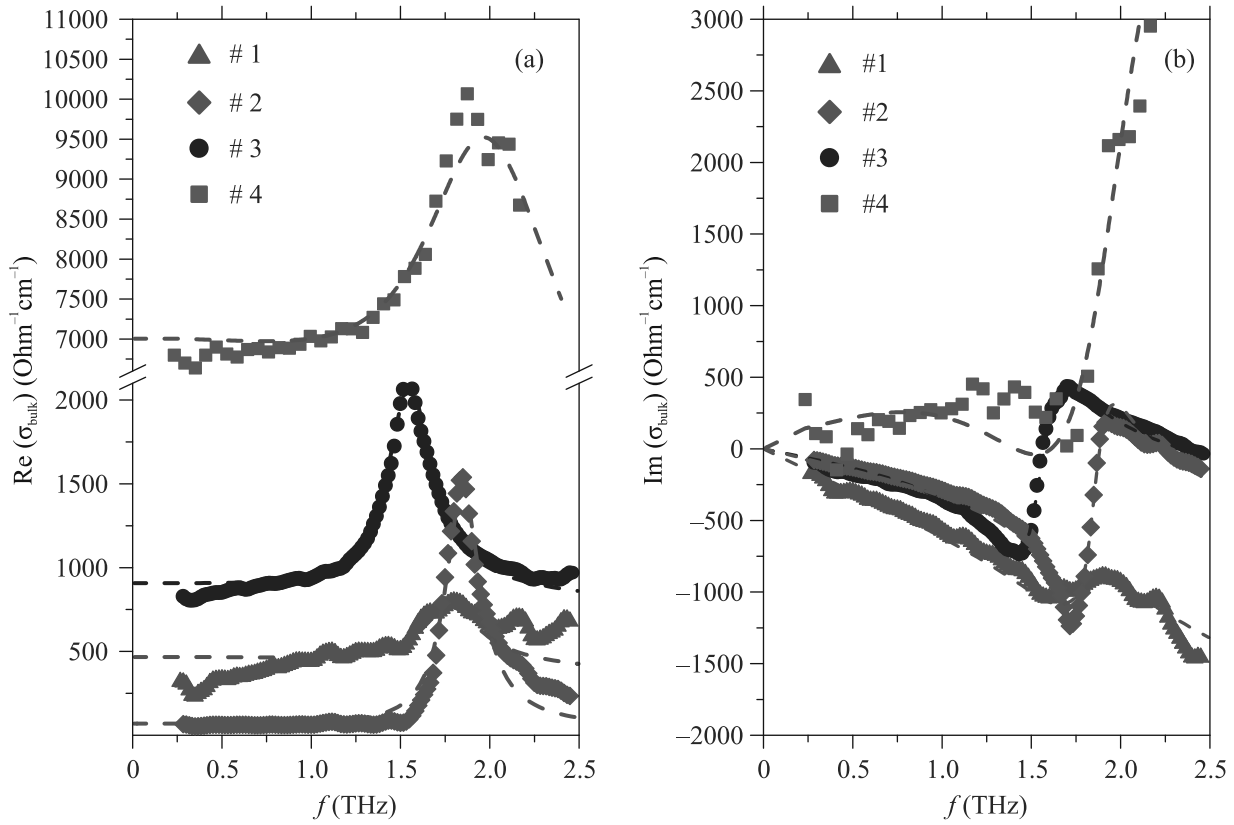


Рис. 1. (Цветной онлайн) Дисперсия действительной (а) и мнимой (б) частей объемной проводимости исследуемых образцов ТИ

где f_{pD} и f_{pL} – плазменные частоты свободных и связанных электронов, γ_D и γ_L – соответствующие постоянные затухания, f_{0L} – частота фона, ε_∞ и ε_0 – высокочастотная и статическая диэлектрические проницаемости. Расчетные спектры объемной проводимости показаны пунктиром на рис. 1, видно неплохое согласие между результатом моделирования по формуле (3) и экспериментом. Для последующей характеристики образцов ТИ нам важно было знать положение уровня Ферми относительно объемной запрещенной зоны. Это можно сделать, рассчитав концентрацию свободных носителей, связанную со статической проводимостью. Тогда в приближении для сильно вырожденных полупроводников, можно получить следующие выражения для разности энергий дна зоны проводимости и уровня Ферми $\Delta E = E_c - E_F$ для n - и p -типа:

$$\Delta E = \begin{cases} -\frac{h^2}{2m_n^*} \sqrt[3]{\left(\frac{3}{8\pi} \frac{\text{Re}\sigma_0^{\text{bulk}}}{e\mu_n}\right)^2}, & n\text{-тип}, \\ E_g + \frac{h^2}{2m_h^*} \sqrt[3]{\left(\frac{3}{8\pi} \frac{\text{Re}\sigma_0^{\text{bulk}}}{e\mu_h}\right)^2}, & p\text{-тип}, \end{cases} \quad (4)$$

где σ_0^{bulk} – статическая объемная проводимость,

$m_{n,h}^*$ – эффективные массы электронов и дырок, $\mu_{n,h}$ – подвижности электронов и дырок, E_g – ширина запрещенной зоны. Напротив, в случае малой статической проводимости (низкой концентрации свободных носителей) можно применить приближение невырожденного полупроводника и воспользоваться соотношениями:

$$\Delta E = \quad (5)$$

$$= \begin{cases} k_b T \ln \left[\frac{2\mu_n e}{\text{Re}\sigma_0^{\text{bulk}}} \sqrt[3]{\left(\frac{2\pi m_n^* k_b T}{h^2}\right)^2} \right], & n\text{-тип}, \\ E_g - k_b T \ln \left[\frac{2\mu_h e}{\text{Re}\sigma_0^{\text{bulk}}} \sqrt[3]{\left(\frac{2\pi m_h^* k_b T}{h^2}\right)^2} \right], & p\text{-тип}. \end{cases}$$

Полагая для образцов #1, 2 эффективную массу электронов $m_n^* = 0.21m_e$ [22], для образцов #3, 4 эффективную массу дырок $m_h^* = 0.42m_e$ [23], и $E_g = 0.203$ эВ [24], мы определили сдвиги энергии Ферми (табл. 2). В результате уровень Ферми в Bi_2Se_3 (#1) находится на 0.1 эВ выше дна зоны проводимости E_c ($E_c - E_F < 0$), а в образце Bi_2Te_3 (#3) на 0.04 эВ ниже потолка валентной зоны. Ниже всех

уровень Ферми расположен у образца Sb_2Te_3 (#4), что полностью коррелирует с наибольшей удельной проводимостью и, как следствие, значительным поглощением в ТГц спектральном диапазоне.

Таблица 2. Положение уровня Ферми

Номер образца	Объемная концентрация носителей N , см^{-3}	Разность энергий $\Delta E = E_c - E_F$, эВ
# 1	6.9×10^{18}	-0.1
# 2	5.7×10^{17}	0.06
# 3	3.5×10^{19}	0.25
# 4	4.5×10^{19}	0.36

2. Генерация третьей гармоники ТГц излучения.

2.1. Методика эксперимента. В качестве источника сильного ТГц поля для последующего преобразования частоты использовался метод оптического выпрямления в кристалле ниобата лития (НЛ) импульсов с наклонным фронтом, генерируемых титан-сафировым лазером, на установке, подробно описанной в [8]. После кристалла НЛ был установлен полосовой фильтр, который выделял ТГц излучение накачки на основной частоте 0.7 ТГц. Пиковая напряженность ТГц поля составляла около 60 кВ/см. После образца ТИ, в котором осуществлялось умножение частоты излучения ТГц накачки, был установлен второй полосовой фильтр, который подавлял ТГц излучение на основной частоте и пропускал только его третью гармонику на частоте 2.1 ТГц. Амплитуда ТГц импульсов накачки и третьей гармоники измерялась электрооптическим методом на кристалле ZnTe толщиной 2 мм с использованием зондирующих лазерных импульсов длительностью 100 фс. В работе исследовались временные зависимости третьей гармоники ТГц излучения, полученной в ТИ с разными толщинами и составами из табл. 1. Пример такой временной зависимости приведен на рис. 2а для образца # 2. Также на рис. 2б приведен Фурье-спектр сигнала. Видно, что, несмотря на наличие узкополосного ТГц фильтра, выделяющего излучение на частоте третьей гармоники, часть излучения ТГц накачки основной частоты проходит через фильтр. В дальнейшем интерес для нас представляла только Фурье-амплитуда сигнала третьей гармоники на частоте 2.1 ТГц.

2.2. Анализ экспериментальных результатов. Измеренная в эксперименте напряженность поля третьей гармоники на выходе исследуемых образцов $E_{3\omega}^{\text{out}}$ представлена в табл. 3. Абсолютные значения $E_{3\omega}^{\text{out}}$ были получены на основе калибровки по напряженности поля третьей гармоники в графене с из-

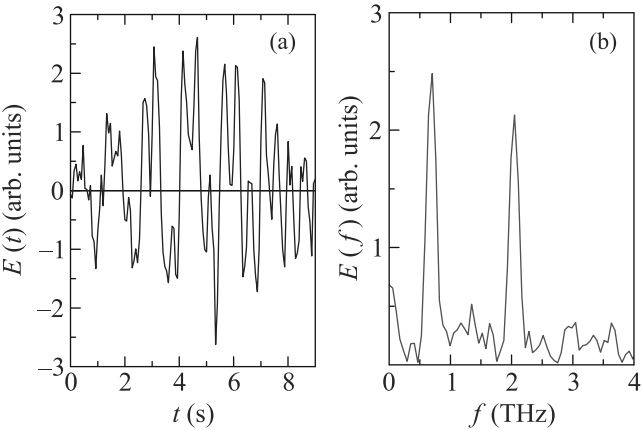


Рис. 2. (Цветной онлайн) Пример временной зависимости напряженности поля ТГц импульса третьей гармоники и его спектр в образце # 2 ($\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$)

Таблица 3. Напряженность поля и эффективность генерации третьей гармоники

Образец	$E_{3\omega}^{\text{out}}$, В/см	$T_{3\omega}$, %	$E_{3\omega}^{\text{in}}$, В/см	η , %
# 1	5.5	97.1	5.7	0.01
# 2	6.6	51.3	12.9	0.02
# 3	5.6	17.8	31.5	0.05
# 4	1.8	2.2	81.8	0.14

вестной кубической восприимчивостью [8, 11], в котором эффективность преобразования по полю в третью гармонику была равна 0.5 %. Однако этих данных недостаточно, чтобы определить эффективность преобразования частоты за счет динамики поверхностных носителей в ТИ, так как необходимо учесть потери на отражение на границе раздела среды и поглощение излучения в объеме ТИ. Для определения поля $E_{3\omega}^{\text{in}}$, рождающегося в толще образца, мы использовали результаты раздела 1.2, в котором была рассчитана удельная проводимость для всех исследуемых образцов на основе их пропускания по полю в ТГц диапазоне. Таким образом, с учетом потерь была рассчитана напряженность поля третьей гармоники $E_{3\omega}^{\text{in}} = E_{3\omega}^{\text{out}}/T_{3\omega}$, и эффективность преобразования излучения $\eta = E_{3\omega}^{\text{in}}/E_{\omega}$ (табл. 3). На рисунке 3 изображена зависимость эффективности преобразования ТГц излучения в третью гармонику от разности энергий дна зоны проводимости E_c и уровня Ферми E_F . Видно, что эта зависимость носит монотонно возрастающий характер с понижением уровня Ферми. Согласно кинетической теории генерации третьей гармоники свободными носителями на поверхности ТИ [9], третья гармоника фототока в ТИ обратно пропорциональна энергии Ферми E_F . E_F – основной параметр, характеризующий исследуемые образцы ТИ. Он исключительно важен для генера-

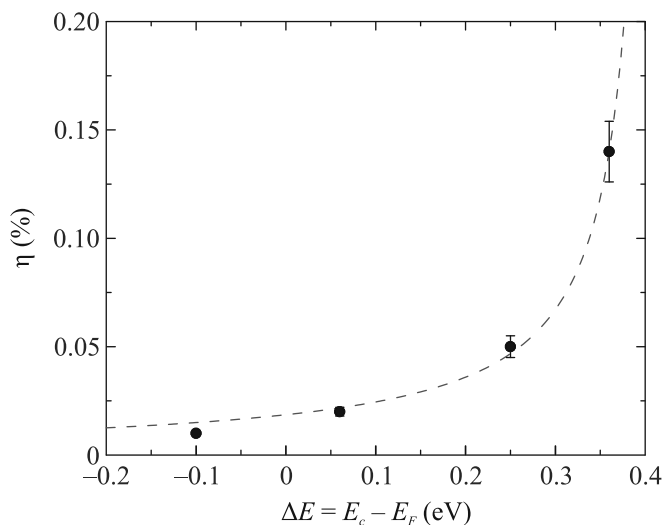


Рис. 3. (Цветной онлайн) Эффективность преобразования в третью ТГц гармонику в зависимости от положения уровня Ферми в образцах ТИ

ции высших ТГц гармоник, так как определяет, какая часть дираковского конуса не занята носителями заряда. Нелинейный ток зависит от многих факторов, в том числе от времен релаксации носителей. Мы полагаем, что времена релаксации незначительно отличаются у родственных материалов, поэтому основным фактором, влияющим на амплитуду третьей гармоники, является энергия Ферми. Наиболее важен для генерации третьей гармоники линейный характер закона дисперсии электронов, именно он приводит к нелинейному отклику на внешнее терагерцовое поле, как следует и из эксперимента, и из теории [9]. Например, для параболических зон в 2D системах ток на частоте 3-й гармоники равен нулю. Жесткая связь спина с импульсом, безусловно, важна для ТИ, однако, в рассматриваемой модели [9] это не учитывается. По-видимому, отличие в эффективности преобразования ТИ от графена большей частью обусловлено различием времен релаксации, что было показано в экспериментах “накачка-зондирование” [8], это же приводит к более раннему насыщению третьей гармоники при увеличении напряженности поля накачки. Напряженность поля, генерируемого нелинейным током, также обратна пропорциональна E_F , и может быть аппроксимирована зависимостью вида:

$$E_{3\omega}^{\text{in}}(f) \propto \frac{1}{E_F} = \frac{1}{E_c - (E_c - E_F)} \equiv \frac{1}{E_c - \Delta E}, \quad (6)$$

где $\Delta E \equiv E_c - E_F$, E_c — энергия дна зоны проводимости. Результат аппроксимации эксперименталь-

ных данных выражением вида (6) свидетельствует об удовлетворительном согласии теории и эксперимента. В ТИ на основе халькогенидов висмута и сурьмы, таких как Bi_2Se_3 , энергия Ферми поверхностных электронов может быть достаточно большой. Согласно (6), эффективность генерации третьей гармоники при заданной амплитуде электрического поля накачки уменьшается в 2D-системах Дирака с большой энергией E_F . Также можно видеть, что эффективность преобразования накачки в излучение 3-й гармоники значительно больше в образце #4 (Sb_2Te_3), чем в остальных. Однако этот образец в ТГц диапазоне имеет наибольшую объемную проводимость (рис. 1), а значит и коэффициент поглощения, что значительно уменьшает итоговую выходную напряженность поля третьей гармоники $E_{3\omega}^{\text{out}}$. Возможный способ избавиться от поглощения связан с использованием образцов существенно меньшей толщины порядка нескольких элементарных пятислойных блоков. Один такой блок имеет толщину около 1 нм. Как известно из [24], с уменьшением толщины ниже определенных размеров ТИ теряют свои свойства; при достижении толщины, равной восьми элементарным блокам, дираковский конус преобразуется в пару электронных зон с запрещенной зоной между ними. Поскольку в двумерных системах переход от линейного электронного спектра к параболическому приводит к исчезновению нелинейного тока на частоте третьей гармоники, то для достижения максимальной напряженности поля представляется целесообразным использование образцов теллурида сурьмы с минимально возможной толщиной, но ограниченной снизу величиной не меньшей толщины десяти элементарных пятислойных блоков (10 нм) во избежание подобных нежелательных эффектов. Также следует отметить, что возможные отклонения от линейного закона дисперсии, безусловно, должны влиять на эффективность преобразования в 3-ю гармонику, как при увеличении энергии Ферми, так и при ее уменьшении. Как следует из эксперимента, эти изменения незначительны в диапазоне химических соединений на конфигурационно-структурной диаграмме (x, y) от Bi_2Se_3 до Sb_2Te_3 . Однако при выходе за эти крайние “точки” можно ожидать отклонения зависимости амплитуды поля третьей гармоники от зависимости вида $\sim 1/E_F$.

Заключение. В работе исследована генерация третьей ТГц гармоники в ТИ на основе халькогенидов висмута и сурьмы ($\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$) с различной объемной проводимостью. Показано, что эффективность генерации третьей гармоники, рассчитанная из экспериментальных данных с исключени-

ем влияния потерь при распространении в образцах, обратно пропорциональна энергии Ферми. Обнаружено, что наибольшей эффективностью преобразования обладает материал теллурид сурьмы. Для получения максимальной эффективности преобразования излучения накачки в выходное излучение на частоте третьей ТГц гармоники предложено использовать образцы теллурида сурьмы толщиной около десяти элементарных пятислойных блоков.

Авторы выражают благодарность С. А. Тарасенко за плодотворные консультации, а также С. П. Ковалеву и И. Е. Илякову за неоценимую помощь в измерениях терагерцовой третьей гармоники.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант 22-22-00758).

1. B. A. Volkov and O. A. Pankratov, JETP **42**, 178 (1985).
2. M. Z. Hasan and C. L. Kane, Rev. Mod. Phys. **82**, 3045 (2010); DOI: 10.1103/RevModPhys.82.3045.
3. D. A. Kozlov, Z. D. Kvon, E. B. Olshanetsky, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretzky, and D. Weiss, Phys. Rev. Lett. **112**, 196801 (2014); DOI: 10.1103/PhysRevLett.112.196801.
4. P. Olbrich, L. E. Golub, T. Herrmann, S. N. Danilov, H. Plank, V. V. Bel'kov, G. Mussler, Ch. Weyrich, C. M. Schneider, J. Kampmeier, D. Grützmacher, L. Plucinski, M. Eschbach, and S. D. Ganichev, Phys. Rev. Lett. **113**, 096601 (2014); DOI: 10.1103/PhysRevLett.113.096601.
5. K. M. Dantscher, D. A. Kozlov, P. Olbrich et al. (Collaboration), Phys. Rev. **92**, 165314 (2015); DOI: 10.1103/PhysRevB.92.165314.
6. K. A. Kuznetsov, D. A. Safronenkov, P. I. Kuznetsov, and G. Kh. Kitaeva, Appl. Sci. **11**, 5580 (2021); DOI: 10.3390/app11125580.
7. F. Giorgianni, E. Chiadroni, A. Rovere et al. (Collaboration), Nat. Commun. **7**, 11421 (2016); DOI: 10.1038/ncomms11421.
8. S. Kovalev, K.-J. Tielrooij, J. C. Deinert et al. (Collaboration), NPJ QM **6**, 84 (2021); DOI: 10.1038/s41535-021-00384-9.
9. K. A. Kuznetsov, S. A. Tarasenko, P. M. Kovaleva, P. I. Kuznetsov, D. V. Lavrukhin, Yu. G. Goncharov, A. A. Ezhov, D. S. Ponomarev, and G. Kh. Kitaeva, Nanomaterials **12**, 3779 (2022); DOI: 10.3390/nano12213779.
10. K.-J. Tielrooij, A. Principi, D. S. Reig et al. (Collaboration), Light Sci. Appl. **11**, 2047 (2022); DOI: 10.1038/s41377-022-01008-y.
11. H. A. Hafez, S. Kovalev, J.-Ch. Deinert et al. (Collaboration), Nature **561**, 507 (2018); DOI: 10.1038/s41586-018-0508-1.
12. H. A. Hafez, S. Kovalev, K.-J. Tielrooij, M. Bonn, M. Gensch, and D. Turchinovich, Adv. Opt. Mater. **8**, 1900771 (2020); DOI: 10.1002/adom.201900771.
13. S. Kovalev, R. M. A. Dantas, S. Germanskiy, J.-Ch. Deinert, B. Green, I. Ilyakov, N. Awari, M. Chen, M. Bawatna, J. Ling, F. Xiu, P. H. M. van Loosdrecht, P. Surowka, T. Oka, and Zh. Wang, Nat. Commun. **11**, 2451 (2020); DOI: 10.1038/s41467-020-16133-8.
14. Z. Mics, K.-J. Tielrooij, Kh. Parvez, S. A. Jensen, I. Ivanov, X. Feng, K. Müllen, M. Bonn, and D. Turchinovich, Nat. Commun. **6**, 7655 (2015); DOI: 10.1038/ncomms8655.
15. J. C. Deinert, D. A. Iranzo, R. Perez et al. (Collaboration), ACS Nano **15**, 1145 (2021); DOI: 10.1021/acsnano.0c08106.
16. P. I. Kuznetsov, V. O. Yapaskurt, B. S. Shchamkhalova, V. D. Shcherbakov, G. G. Yakushceva, V. A. Luzanov, and V. A. Jitov, J. Cryst. Growth **455**, 122 (2016); DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2016.09.055.
17. Z. Ren, A. A. Taskin, S. Sasaki, K. Segawa, and Y. Ando, Phys. Rev. **84**, 165311 (2011); DOI: 10.1103/PhysRevB.84.165311.
18. W. Withayachumnankul and M. Naftaly, J. Infrared Millim. Terahertz Waves **35**, 610 (2014); DOI: 10.1007/s10762-013-0042-z.
19. M. Tinkham, Phys. Rev. **104**, 845 (1956); DOI: 10.1103/PhysRev.104.845.
20. L. S. Bilbro, R. Valdés Aguilar, G. Logvenov, O. Pelleg, I. Božović, and N. P. Armitage, Nat. Phys. **7**, 298 (2011); DOI: 10.1038/nphys1912.
21. K. Kuznetsov, P. Kuznetsov, A. Frolov, S. Kovalev, I. Ilyakov, A. Ezhov, and G. Kh. Kitaeva, Opt. Eng. **60**, 082012 (2021); DOI: 10.1117/1.OE.60.8.082012.
22. Y.-B. Gao, B. He, D. Parker, I. Androulakis, and J. P. Heremans, Phys. Rev. B **90**, 125204 (2014); DOI: 10.1103/PhysRevB.90.125204.
23. B.-L. Huang and M. Kaviani, Phys. Rev. B **77**, 125209 (2008); DOI: 10.1103/PhysRevB.77.125209.
24. B. C. Park, T.-H. Kim, K.-I. Sim, B. Kang, J. W. Kim, B. Cho, K.-H. Jeong, M.-H. Cho, and J. H. Kim, Nat. Commun. **6**, 6552 (2015); DOI: 10.1038/ncomms7552.

Парные связанные состояния в континууме в волноводах с резонатором Фабри–Перо

Н. М. Шубин, В. В. Капаев, А. А. Горбачевич¹⁾

Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 11 июля 2023 г.

После переработки 10 августа 2023 г.

Принята к публикации 10 августа 2023 г.

Рассматриваются связанные состояния в континууме (ССК) в резонаторе Фабри–Перо (ФП) внутри квантово-механического волновода. Показано, что в случае, когда ССК существует уже в изолированных зеркалах, в ФП резонаторе, помимо типичных ФП ССК, соответствующих дискретному набору длин резонатора, появляются симметричный и антисимметричный парные ССК (ПССК). В отличие от ФП ССК, ПССК не требует формирования стоячей волны ФП резонанса между зеркалами, поэтому энергия и параметры ПССК практически не зависят от длины ФП резонатора, а его волновая функция имеет экспоненциально малую амплитуду между зеркалами. Результаты численного моделирования двумерного квантово-механического волновода с двумя притягивающими областями рассеяния (“примесями”), играющими роль зеркал, проиллюстрированы наглядной аналитической моделью.

DOI: 10.31857/S1234567823180040, EDN: wppesb

Введение. Связанные состояния в континууме (ССК) – это локализованные состояния с энергиями, лежащими в континууме распространяющихся состояний. ССК – это фундаментальное явление интерференции волн, которое можно наблюдать в физических системах различной природы: квантово-механических, электромагнитных, акустических (см., например, обзоры [1–3]). ССК можно рассматривать как резонанс с нулевой шириной и формально бесконечной добротностью (без учета материальных потерь). ССК ортогональны распространяющимся состояниям и не связаны с ними. Условие расщепления с непрерывным спектром соответствует выделенной точке в пространстве параметров системы, что вряд ли может быть точно достигнуто на практике. Тем не менее, вблизи этой точки ССК переходит в узкий резонанс (квази-ССК), который обладает чрезвычайно высокой добротностью. Таким образом, изучение ССК обеспечивает регулярный способ построения структур с высокой добротностью, имеющий практическую значимость для широкого круга приложений, включая лазеры с компактным резонатором [4–7], генерацию высших гармоник [8], сенсорику [9] и т.д. Возможно также и дополнительное увеличение Q -фактора вблизи точки слияния ССК [10–12]. В работах [13–15] слияние ССК интерпретируется как аннигиляция частицеподобных объектов с топологическими зарядами про-

тивоположного знака. В этом письме мы продолжаем аналогию ССК с частицеподобными объектами, которые в нашем случае взаимодействуют друг с другом туннельным образом на расстоянии.

Деструктивная интерференция, обеспечивающая ортогональность ССК и состояний континуума, может иметь симметричное происхождение, как в случае ССК защищенных симметрией, или может быть следствием рассеяния на двух или более резонансах – ССК Фридриха–Винтгена (ФВ) [16]. ССК Фабри–Перо (ФП) [11, 17–22] зачастую рассматривают как отдельный вид ССК, который образуется при совпадении условия набег фазы в ФП резонаторе и энергии (частоты) нулевой прозрачности зеркал (антирезонанс Фано) с учетом взаимодействия зеркал через затухающие моды [19]. Таким образом, ФП ССК возникают при дискретном наборе длин резонатора, когда разность кругового набег фазы есть целое кратное 2π . В настоящем письме мы сосредоточимся на квантово-механической модели волновода, которая допускает прозрачное аналитическое рассмотрение и где многомодовая интерференция обеспечивает различные особенности формирования ССК [23]. Тем не менее, предыдущие исследования физики ССК в квантово-механических и оптических волноводах [11, 23, 24] дают основания полагать, что основные результаты нашей работы будут качественно справедливы и для оптических систем. Показано, что в геометрии ФП могут существовать ССК нового типа, которые появляются всегда парами при прак-

¹⁾e-mail: gorbachevichaa@lebedev.ru

тически любой длине ФП резонатора (за исключением очень малых длин). Такие парные ССК (ПССК) возникают в резонаторе ФП с зеркалами, имеющими ФВ ССК. В некотором смысле физический механизм возникновения ПССК можно рассматривать как продолжение аналогии между ССК и частицеподобными объектами на случай туннельной связи между двумя ФВ ССК.

Численный расчет. Для ФП ССК требуется ФП резонатор и идеальные зеркала. Рассмотрим двумерный квантово-механический однородный вдоль оси x (направление распространения) волновод шириной H , окруженный потенциальным барьером $U_0 > 0$ в направлении y с двумя одинаковыми рассеивающими областями (“примесиями”) длины L и ширины h с притягивающим потенциалом $U_w < 0$, которые играют роль зеркал (см. рис. 1а). Известно, что такие “примеси” демонстрируют антирезонансы Фано в спектре пропускания и, следовательно, при определенных энергиях становятся совершенно непрозрачными [19, 25, 26]. Таким образом, при соответствующих энергиях (или близких к ним) можно ожидать образования ФП ССК при необходимом выборе расстояния D между “примесиями” (длины ФП резонатора). Более того, многомодовая интерференция в таких волноводных системах обеспечивает весьма богатое поведение интерференционных явлений даже для отдельной “примеси” [23, 25]. Изменяя один параметр (например, длину “примеси” L), можно управлять ее антирезонансами вплоть до образования ССК [19, 25, 26]. Взаимодействие ССК в одиночных зеркалах и ФП ССК в резонаторе является основным объектом нашего исследования в настоящем письме.

Рассмотрим движение электрона с эффективной массой $0.0665m_0$ и положим $U_0 = 1$ эВ и $U_w = -0.3$ эВ. Выбранные параметры имеют типичные значения для материалов на основе GaAs. Для удобства численных расчетов поперечные моды непрерывного спектра моделировались плотным набором дискретных состояний, для чего в структуру были добавлены искусственные бесконечно высокие барьеры на расстоянии Δ от волновода. Решение двумерного уравнения Шредингера, описывающего рассеяние или задачу на собственные значения в этой структуре, получено с помощью метода разложения по поперечным модам [25, 27–30]. Конкретные значения числа учитываемых поперечных мод N и параметра Δ выбираются согласованно, исходя из сходимости результатов численного моделирования к точному решению ($N \rightarrow \infty$, $\Delta \rightarrow \infty$). Выбранные в настоящей статье значения $N = 10$ и $\Delta = 5$ нм обеспе-

чивают относительную погрешность численных значений энергии и параметров ССК, определяемую по величине погрешности выполнения закона сохранения потока вероятности, не более 10^{-4} .

Помимо ССК, в изолированных “примесях” [25], может наблюдаться слияние антирезонансов [23], которое определяет наличие или отсутствие деструктивной интерференции и, следовательно, может нарушить возможность образования ФП резонанса. Эти явления выходят за рамки настоящего письма и заслуживают отдельного рассмотрения. В связи с этим, параметры структуры для численного моделирования выбираются таким образом, чтобы уменьшить влияние высших мод и предотвратить упомянутый выше эффект слияния. Выбираем $H = 5$ нм и $h = 3.5$ нм, а остальные геометрические параметры D и L варьруем для изучения условий формирования ССК. Интересующий нас диапазон энергий лежит между порогами первой и второй мод в волноводе, которые для рассматриваемых значений параметров составляют $E_1 \approx 131.8$ мэВ и $E_2 \approx 506.3$ мэВ соответственно.

На рисунке 1б,с показаны численно рассчитанные зависимости энергии ССК и необходимой для его образования длины “примесей” (зеркал) от заданного расстояния D между ними. Вблизи энергии $E_{BIC,1}$ и значения длины $L_{BIC,1}$, соответствующей ССК в изолированной “примеси”, существует пара ССК (симметричный и антисимметричный), слабо зависящих от длины ФП резонатора D и следующие за ССК в одной “примеси”. Назовем такие ССК парными (ПССК). Отметим, что наблюдаемое туннельное расщепление ССК не связано с туннельным расщеплением антирезонансов изолированных зеркал как, например, в работах [31, 32], а непосредственно возникает из-за туннельного расщепления ССК в изолированных зеркалах по аналогии с обычными связанными состояниями, например, в квантовых ямах (хотя эта аналогия, конечно, не буквальная). Вообще говоря, ФП ССК и ПССК в известном смысле комплементарны друг другу. Так, ФП ССК существует в широком диапазоне значений длины зеркал L , но в узком диапазоне расстояний между ними D (дискретный набор значений, удовлетворяющий условию ФП резонанса). С другой стороны, ПССК существуют в узком диапазоне значений L , соответствующих образованию ССК в изолированном зеркале, но, в то же время, в широком диапазоне значений D .

Вблизи энергии и параметров, соответствующих ССК в отдельном зеркале, ПССК и ФП ССК гибридизуются и между ними происходит непрерывная трансформация при изменении параметров (см.

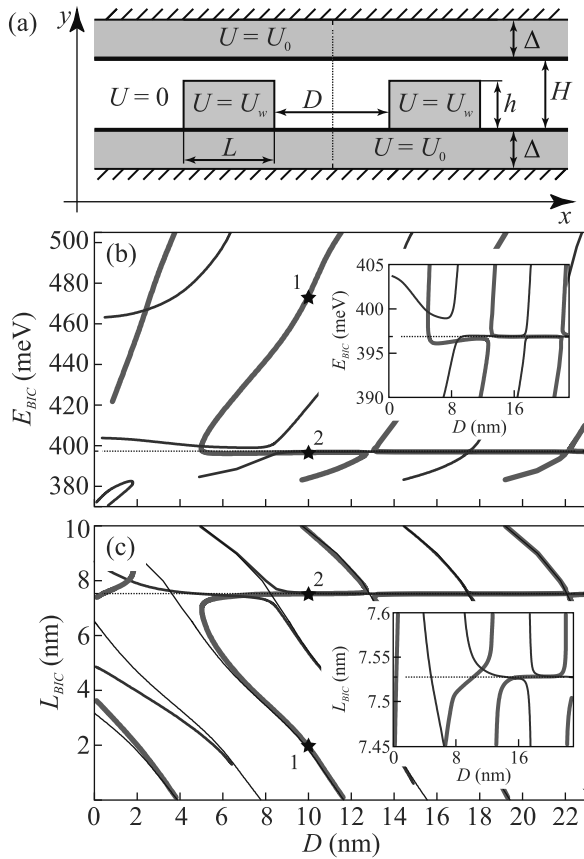


Рис. 1. (Цветной онлайн) (a) – Схема двумерного квантово-механического волновода с двумя притягивающими “примесями”. Численно рассчитанная зависимость энергии ССК E_{BIC} (b) и соответствующей длины “примеси” L_{BIC} (c) от расстояния между ними D . Красная жирная и синяя тонкая линии описывают симметричный и антисимметричный ССК соответственно. Горизонтальные тонкие пунктирные черные линии показывают энергию $E_{BIC,1} \approx 396.869$ мэВ и соответствующую длину $L_{BIC,1} \approx 7.528$ нм для ССК в изолированной “примеси”. На вставках показано поведение ССК вблизи ССК в изолированной “примеси”. Вдали от ССК изолированной “примеси”, ФП ССК следуют условию для набег фазы в ФП резонаторе (см. тонкие черные сплошные линии в части (c)). Черные звездочки 1 и 2 обозначают соответственно симметричные ФП ССК и ПССК, распределения плотности вероятности которых показаны на рис. 2

вставки на рис. 1b, c). Гибридизация происходит из-за эванесцентной связи между “примесями” через затухающие моды и, следовательно, исчезает по мере увеличения расстояния между ними. Важно обратить внимание, что при фиксированном значении параметров D и $L = L_{BIC}$ в системе существует только один ПССК. Второй ПССК с близкой энергией существует при близких, но все же отличающихся параметрах. В частности, совпадение энергий ССК, име-

ющее место на рис. 1b, кажущееся, так как при этом эти ССК соответствуют различным значениям параметра L (рис. 1c), т.е. квантово-механическое вырождение в обычном понимании отсутствует.

Вдали от энергии и параметров, соответствующих ССК в изолированной “примеси”, существуют ФП ССК, которые с высокой точностью подчиняются простым одномодовым условиям образования ФП резонанса с учетом фазы коэффициента отражения зеркал (показаны тонкими черными линиями на рис. 1c). ФП ССК, естественно, требуют образования ФП резонанса между зеркалами. Следовательно, условие их появления периодически по D , а волновая функция ССК имеет ненулевую амплитуду в первой (распространяющейся) моде внутри ФП резонатора, сравнимую с амплитудой внутри зеркал. Следует отметить, что отражение рассматриваемых зеркал (“примесей”) основано на антирезонансе Фано, для создания которого требуется относительно большая амплитуда волновой функции. С другой стороны, ПССК не нуждаются в ФП резонансе и поэтому почти не зависят от расстояния D между зеркалами, и их волновая функция экспоненциально мала внутри резонатора из-за отсутствия составляющей в распространяющейся моде. Рисунок 2 иллюстрирует это ключевое различие между волновыми функциями ФП ССК и ПССК.

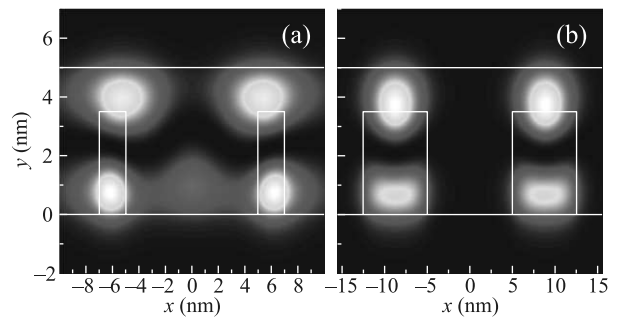


Рис. 2. (Цветной онлайн) Распределение плотности вероятности в симметричных ФП ССК (a) и ПССК (b) при одном и том же расстоянии $D = 10$ нм между “примесями”. Энергия и длина “примеси”, соответствующие этим ССК показаны на рис. 1: $L_{BIC} \approx 2$ нм, $E_{BIC} \approx 472.324$ мэВ для ФП ССК и $L_{BIC} \approx 7.528$ нм, $E_{BIC} \approx 396.583$ мэВ для ПССК

Симметричные ФП ССК возникают, начиная с $L_{BIC} = 0$, что соответствует порогу второй моды в волноводе E_2 . Для антисимметричных состояний всегда имеется область при малых L , где они отсутствуют. С увеличением номера n резонанса ФП эта область уменьшается. Следуя рис. 1c, кривые существования ССК для симметричных ССК выше про-

стого предсказания по фазовым условиям образования ФП резонанса, тогда как для антисимметричных ССК они ниже. Это связано с вкладом высших (затухающих) мод в резонаторе. В конечном итоге это приводит к тому, что при прохождении ССК в одиночной “примеси” ($E_{BIC,1}$, $L_{BIC,1}$) при увеличении L происходит резкое изменение набег фазы в ФП резонаторе на $2\sigma_{s,a}\pi$ ($\sigma_s = 1$ для симметричных состояний и $\sigma_a = -1$ для антисимметричных). Другими словами, ФП ССК с n и $n + 2\sigma_{s,a}$ непрерывно переходят друг в друга при изменении параметров через область ССК в одиночной “примеси”.

Аналитическая модель. Чтобы дать аналитическое описание образования ПССК, рассмотрим модель квантово-механического волновода с δ -функциональными рассеивателями, перепутывающими моды и играющими роль зеркал. Задача рассеяния (как и задача на собственные значения) в этой системе является фактически одномерной с учетом дополнительных измерений путем введения соответствующих мод поперечного размерного квантования [19, 30]. Гамильтониан описанной многомодовой одномерной задачи принимает вид

$$\hat{H} = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} \hat{I} + \hat{V}_0 + \delta\left(x + \frac{D}{2}\right) \hat{V}_1 + \delta\left(x - \frac{D}{2}\right) \hat{V}_2, \quad (1)$$

где $\hat{I}$ – единичная матрица, $\hat{V}_0 = \text{diag}(E_1, E_2, \dots)$ – диагональная матрица, содержащая пороги поперечных мод, а матрица $\hat{V}_i$ представляет внутри- и межмодовые δ -функциональные потенциалы, образующие левое ($i = 1$) и правое ($i = 2$) зеркала. Далее мы сосредоточимся на симметричных системах с $\hat{V}_1 = \hat{V}_2 = \hat{V}$. Здесь выбраны единицы, в которых $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$.

Рассматриваем диапазон энергий между порогами первой и второй мод волновода ($E \in (E_1, E_2)$), поэтому существует только одна распространяющаяся мода, а все остальные – затухающие. Внутри и снаружи резонатора волновод однороден с определенным набором таких мод. В этих областях решение уравнения Шредингера с гамильтонианом (1) выражается в виде суперпозиции распространяющейся и затухающей волн. В каждом δ -зеркале накладывается условие непрерывности волновой функции и разрыва ее производных, следующие из (1):

$$\Psi_{i+1}(x_i) = \Psi_i(x_i), \quad (2a)$$

$$\Psi'_{i+1}(x_i) - \Psi'_i(x_i) = \hat{V}_i \Psi_i(x_i). \quad (2b)$$

Здесь $\Psi_i(x)$ – вектор-столбец волновых функций всех поперечных мод в i -й области ($i = 1$ и $i = 3$ вне

ФП резонатора и $i = 2$ – внутри него) и $x_{1,2} = \pm D/2$ – положения δ -зеркал.

ССК могут быть описаны либо с точки зрения задачи рассеяния как резонансы или антирезонансы с нулевой шириной [25, 33, 34], либо прямым решением задачи на собственные значения с нулевыми исходящими волнами. В пространственно-симметричных системах различают собственные состояния по четности, что позволяет вдвое сократить количество неизвестных переменных (амплитуд волновой функции). Поэтому в симметричных многомодовых структурах удобнее изучать ССК через задачу на собственные значения. Таким образом, ищем симметричный (s) и антисимметричный (a) ССК в виде:

$$\begin{aligned} \Psi_1^{s,a}(x) &= (0, a_2 e^{\kappa_2 x}, a_3 e^{\kappa_3 x}, \dots)^\top, \\ \Psi_2^s(x) &= (b_1 \cos kx, b_2 \cosh \kappa_2 x, b_3 \cosh \kappa_3 x, \dots)^\top, \\ \Psi_2^a(x) &= (b_1 \sin kx, b_2 \sinh \kappa_2 x, b_3 \sinh \kappa_3 x, \dots)^\top, \\ \Psi_3^{s,a}(x) &= \sigma_{s,a} (0, a_2 e^{-\kappa_2 x}, a_3 e^{-\kappa_3 x}, \dots)^\top. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь $\sigma_s = -\sigma_a = 1$, k – волновое число в первой распространяющейся моде, κ_n – постоянная затухания в n -й моде. Применение условия непрерывности (2a) к волновым функциям (3) в первой моде дает $b_1 \cos \frac{kD}{2} = 0$ или $b_1 \sin \frac{kD}{2} = 0$ для симметричного и антисимметричного состояний соответственно. Вместе эти условия могут быть объединены как

$$b_1 \sin kD = 0. \quad (4)$$

Уравнение (4) выполняется, если либо $\sin kD = 0$, что соответствует условию резонанса ФП для точечных (δ -функциональных) зеркал, либо при $b_1 = 0$.

Подстановка $\sin kD = 0$ в условия (2b) показывает, что уравнения для затухающих мод можно решать независимо от распространяющейся моды, что дает связанные состояния в системе затухающих мод (собственные состояния эффективной молекулы ССК, связанной с каналом распространения). В случае ФП ССК амплитуда волновой функции b_1 в распространяющейся моде внутри ФП резонатора отлична от нуля:

$$b_1 = \frac{(-1)^n}{k} \left(V_{12} a_2 e^{-\frac{\kappa_2 D}{2}} + V_{13} a_3 e^{-\frac{\kappa_3 D}{2}} + \dots \right), \quad (5)$$

где V_{1n} с $n \geq 2$ – соответствующие элементы матрицы $\hat{V}$.

Аналогично, условие $b_1 = 0$, примененное к уравнениям (2b), приводит к эффективному отсутствию взаимодействия распространяющейся и эванесцентных мод, что приводит к задаче на собственные значения только для затухающих мод (ССК молекула).

Однако в этом случае задача на собственные значения снабжается дополнительным условием $b_1 = 0$, которое можно сформулировать как обращение в ноль правой части уравнения (5). Это требование просто означает обращение в ноль связи с распространяющейся модой. Таким образом, для ПССК амплитуда волновой функции равна нулю вдоль всей распространяющейся моды, и, как следствие, при $D \rightarrow \infty$ как симметричные, так и антисимметричные ПССК стремятся к ССК в изолированных зеркалах.

Простейшая модель, описывающая ФП ССК подробно обсуждалась в [19] и представляет собой двухмодовый волновод с зеркалами, моделируемыми двумя идентичными δ -функциональными ямами во второй моде, локально связанными с первой распространяющейся модой. ПССК в этой системе отсутствуют потому, что правая часть уравнения (5) имеет только один член в двухмодовом случае, и обращение его в ноль требует либо тождественно нулевой волновой функции, либо тривиального отсутствия какой-либо связи между распространяющейся и затухающей модами.

Гораздо более богатая картина возникает, если в отдельных зеркалах существует ССК, для чего требуется не менее двух резонансов в каждом зеркале [16]. Рассмотрим две затухающие моды с порогами $U \pm \Delta U$, каждая из которых имеет две δ -ямы при $x = \pm D/2$ (см. рис. 3а). Матрица межмодовых связей $\hat{V}$ имеет вид:

$$\hat{V} = \begin{pmatrix} 0 & \gamma_2 & \gamma_3 \\ \gamma_2 & -\alpha_2 & \gamma \\ \gamma_3 & \gamma & -\alpha_3 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Используя формализм [2, 34], нетрудно показать, что ССК существует в одиночном зеркале, если выполняется следующее условие:

$$\alpha_{2,3} = 2\kappa_{2,3} - \gamma \frac{\gamma_{2,3}}{\gamma_{3,2}}, \quad (7)$$

где $\kappa_{2,3} = \sqrt{U \mp \Delta U - E}$.

Применяя граничные условия (2) к решению вида (3) с матрицей $\hat{V}$ из (6), можно определить необходимые параметры для формирования ПССК и ФП ССК. Следуя общему соображению, предложенному выше, симметричные и антисимметричные ФП ССК возникают, если $\sin kD = 0$ и

$$\left(\alpha_2 - \frac{2\kappa_2}{1 + \sigma_{s,a} e^{-\kappa_2 D}} \right) \left(\alpha_3 - \frac{2\kappa_3}{1 + \sigma_{s,a} e^{-\kappa_3 D}} \right) = \gamma^2. \quad (8)$$

Уравнение (8) определяет собственные состояния молекулы ССК – связанные состояния в двух взаимо-

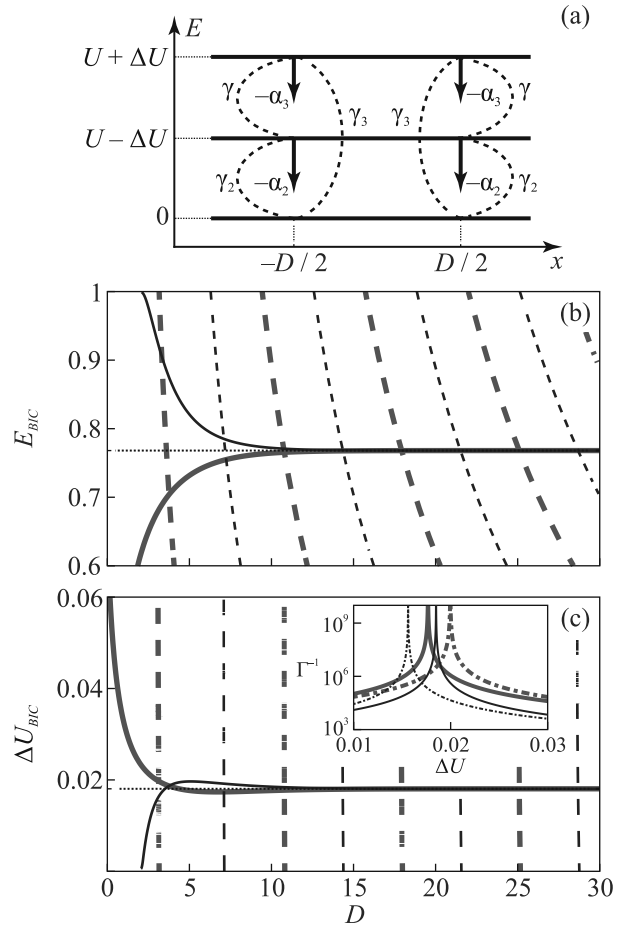


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Схематический вид модели, описывающий формирование ФП ССК и ПССК. Зависимость энергии ССК (b) и необходимого для его формирования значения расщепления между эванесцентными модами (c) от расстояния D между δ -зеркалами. Сплошные линии соответствуют ПССК, а штриховые линии – ФП ССК (жирная красная и тонкая синяя линии указывают на симметричное и антисимметричное состояния соответственно). Горизонтальные тонкие пунктирные черные линии показывают энергию $E_{BIC,1}$ и соответствующее значение параметра $\Delta U_{BIC,1}$ для ССК в изолированном зеркале, определяемые уравнением (7). На вставке в части (c) показана зависимость добротности симметричных (жирные красные линии) и антисимметричных (тонкие синие линии) квази-ПССК от ΔU при $D = 3$ (сплошные линии) и $D = 10$ (штрихпунктирные линии). Параметры выбраны следующим образом: $\alpha_2 = 0.3$, $\alpha_3 = 0.6$, $\gamma_2 = 1$, $\gamma_3 = 0.8$ и $\gamma = 0.5$

действующих эванесцентных модах с четырьмя δ -функциональными ямами. В пределе $D \rightarrow \infty$ условие (8) сводится к $(\alpha_2 - 2\kappa_2)(\alpha_3 - 2\kappa_3) - \gamma^2 = 0$, что соответствует связанным состояниям в затухающих модах для изолированного зеркала и, следовательно-

но, как легко показать, определяет энергии его полной непрозрачности. Из-за требования формирования ФП резонанса волновая функция ФП ССК имеет ненулевую амплитуду в распространяющейся моде внутри резонатора в соответствии с уравнением (5) с V_{12} и V_{13} , взятыми из (6).

Условия образования пары симметричных и антисимметричных ПССК выводятся аналогично и дают следующие два уравнения:

$$\alpha_{2,3} = \frac{2\kappa_{2,3}}{1 + \sigma_{s,a}e^{-\kappa_{2,3}D}} - \gamma \frac{\gamma_{2,3}}{\gamma_{3,2}}. \quad (9)$$

Как и следовало ожидать, при большом расстоянии между зеркалами энергия E_{BIC} и значение требуемого параметра ΔU_{BIC} , вычисляемое по уравнениям (9), стремятся к значениям $E_{BIC,1}$ и $\Delta U_{BIC,1}$, соответствующие ССК в изолированном зеркале и удовлетворяющие условиям (7):

$$\begin{aligned} E_{BIC} &\approx E_{BIC,1} - \frac{\sigma_{s,a}}{4} [\tilde{\alpha}_2^2 e^{-\kappa_2 D} + \tilde{\alpha}_3^2 e^{-\kappa_3 D}], \\ \Delta U_{BIC} &\approx \Delta U_{BIC,1} - \frac{\sigma_{s,a}}{4} [\tilde{\alpha}_2^2 e^{-\kappa_2 D} - \tilde{\alpha}_3^2 e^{-\kappa_3 D}], \end{aligned} \quad (10)$$

где $\tilde{\alpha}_{2,3} = \alpha_{2,3} + \gamma\gamma_{2,3}/\gamma_{3,2}$. Такие ПССК не требуют формирования ФП резонанса и, следовательно, практически не зависят от расстояния между зеркалами, а их волновая функция экспоненциально мала внутри резонатора из-за отсутствия составляющей в распространяющейся моде ($b_0 = 0$). Именно это и наблюдалось при численном моделировании (см. рис. 1 и 2).

Уравнение (8) вместе с $\sin kD = 0$, а также уравнения (9) можно решить численно, чтобы получить энергию E_{BIC} и требуемый параметр (разность энергий между порогами затухающих мод ΔU_{BIC}) для ФП ССК и ПССК соответственно. На рисунке 3б, с показана зависимость E_{BIC} и ΔU_{BIC} от длины резонатора D . Как и в результатах численного моделирования (ср. с рис. 1б, с), видно, что ФП ССК являются периодическими по D , тогда как ПССК демонстрируют довольно слабую зависимость от D , особенно в пределе $D \rightarrow \infty$. Однако, в отличие от результатов численных расчетов, где ПССК и ФП ССК гибридизировались друг с другом, здесь они полностью независимы, что является результатом нулевой ширины зеркал в упрощенной аналитической модели.

Заключение и обсуждение. В настоящем письме численно и аналитически исследованы ССК в квантово-механических волноводных структурах с двумя связанными рассеивающими потенциалами. Благодаря деструктивной многомодовой

интерференции эти потенциалы действуют как зеркала, составляющие резонатор Фабри–Перо (ФП) вместе с полостью между ними. Мы показали, что, помимо хорошо известных ФП ССК, возникающих из-за резонансного удержания между зеркалами, существуют парные ССК (ПССК), связанные с ССК в изолированных зеркалах. ПССК можно рассматривать как результат туннельного взаимодействия двух частицеподобных объектов (мета-атомов), каждый из которых соответствует ССК в изолированном зеркале. Этот результат нетривиален, так как наличие ССК в одиночном резонаторе требует пространственной симметрии в направлении распространения, что уменьшает количество эффективных каналов, необходимых для его формирования [12, 35]. В структуре ФП резонатора пространственная симметрия для каждого отдельного зеркала локально отсутствует из-за наличия другого зеркала, хотя и существует для всей структуры в целом. Следовательно, *a priori* не было очевидно, что ССК одиночного зеркала будут существовать и в структуре с двумя зеркалами.

Рассмотрение ПССК в настоящем письме ограничено квантово-механической моделью в иллюстративных целях. Однако основные практические приложения ССК в настоящее время существуют в классических волновых системах: электромагнитных или акустических [2, 3]. В волноводах уравнения Шредингера и Гельмгольца для нормального падения ($k_z = 0$) волны в ТЕ поляризации схожи, но, в частности, из-за частотной зависимости параметров решение последнего представляет собой нелинейную задачу на собственные значения. Следовательно, аналитическое рассмотрение электромагнитных волноводов, раскрывающее основные физические механизмы, гораздо менее прозрачно, чем квантово-механическое. Тем не менее, в силу принципиальной аналогии волновых явлений, качественная картина образования ПССК должна быть справедливой и для волноводов другой физической природы (в том числе и электромагнитных). Необходимо также отметить, что в случае ТМ поляризации существует нулевая мода (с постоянным значением поля поперек волновода), что может иметь качественное влияние на все интерференционные явления, в том числе и на ССК. Поэтому образование и поведение ССК в такой поляризации требует отдельного исследования.

ПССК не требуют формирования ФП резонанса (стоячей волны большой амплитуды) для своего возникновения. Следовательно, они существуют почти при любых расстояниях между зеркалами, за исключением очень малых, когда внутризеркальные

структуры разных зеркал начинают сильно взаимодействовать друг с другом. В этой области энергия ПССК становится зависимой от длины ФП резонатора и может непрерывно регулироваться ее изменением, что важно для практических приложений.

Волновые функции ПССК имеют в резонаторе исчезающе малую амплитуду, оставаясь при этом когерентной по всей структуре. Возникает интригующий вопрос, может ли ПССК служить посредником взаимодействия удаленных квантовых объектов (например, кубитов), что заслуживает отдельного изучения. Другим интересным предметом последующих исследований являются свойства более крупных ССК молекул с тремя или более мета-атомами, а также массивы взаимодействующих ССК и их связь с ССК метаповерхностями.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект # 21-19-00808).

1. C. W. Hsu, B. Zhen, A. D. Stone, J. D. Joannopoulos, and M. Soljačić, *Nat. Rev. Mater.* **1**, 16048 (2016).
2. A. F. Sadreev, *Rep. Prog. Phys.* **84**, 055901 (2021).
3. К. Л. Кошелев, З. Ф. Садриева, А. А. Щербаков, Ю. С. Кившарь, А. А. Богданов, *УФН* **193**, 528 (2023).
4. A. Kodigala, T. Lepetit, Q. Gu, B. Bahari, Y. Fainman, and B. Kanté, *Nature* **541**, 196 (2017).
5. K. Koshelev, S. Kruk, E. Melik-Gaykazyan, J. H. Choi, A. Bogdanov, H.-G. Park, and Yu. Kivshar, *Science* **367**, 288 (2020).
6. M. S. Hwang, H. C. Lee, K. H. Kim, K. Y. Jeong, S.-H. Kwon, K. Koshelev, Yu. Kivshar, and H.-G. Park, *Nat. Commun.* **12**, 4135 (2021).
7. М. Ю. Губин, А. В. Шестериков, В. С. Волков, А. В. Прохоров, *Письма в ЖЭТФ* **117**, 273 (2023).
8. L. Carletti, S. S. Kruk, A. A. Bogdanov, C. De Angelis, and Yu. Kivshar, *Phys. Rev. Res.* **1**, 023016 (2019).
9. F. Yesilkoy, E. R. Arvelo, Y. Jahani, M. Liu, A. Tittl, V. Cevher, Yu. Kivshar, and H. Altug, *Nat. Photonics* **13**, 390 (2019).
10. E. Bulgakov, A. Pilipchuk, and A. Sadreev, *Phys. Rev. B* **106**, 075304 (2022).
11. L. Huang, B. Jia, Y. K. Chiang, S. Huang, C. Shen, F. Deng, T. Yang, D. A. Powell, Y. Li, and A. E. Miroshnichenko, *Adv. Sci.* **9**, 2200257 (2022).
12. N. M. Shubin, *J. Math. Phys.* **64**, 042103 (2023).
13. B. Zhen, C. W. Hsu, L. Lu, A. D. Stone, and M. Soljačić, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 257401 (2014).
14. H. M. Doeleman, F. Monticone, W. den Hollander, A. Alu, and A. F. Koenderink, *Nat. Photonics* **12**, 397 (2018).
15. M. Kang, S. Zhang, M. Xiao, and H. Xu, *Phys. Rev. Lett.* **126**, 117402 (2021).
16. H. Friedrich and D. Wintgen, *Phys. Rev. A* **32**, 3231 (1985).
17. T. V. Shahbazyan and M. E. Raikh, *Phys. Rev. B* **49**, 17123 (1994).
18. Sh. Fan, P. R. Villeneuve, J. D. Joannopoulos, M. J. Khan, C. Manolatu, and H. A. Haus, *Phys. Rev. B* **59**, 15882 (1999).
19. Ч. С. Ким, О. Н. Рознова, А. М. Сатанин, В. Б. Штенберг, *ЖЭТФ* **121**, 1157 (2002).
20. E. N. Bulgakov and A. F. Sadreev, *JETP Lett.* **90**, 744 (2010).
21. A. F. Sadreev, E. N. Bulgakov, and I. Rotter, *JETP Lett.* **82**, 498 (2005).
22. D. C. Marinica, A. G. Borisov, and S. V. Shabanov, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 183902 (2008).
23. N. M. Shubin, V. V. Капаев and A. A. Gorbatsevich, *Phys. Rev. B* **106**, 125425 (2022).
24. N. M. Shubin, V. V. Капаев, and A. A. Gorbatsevich, *Phys. Rev. B* **104**, 125414 (2021).
25. C. S. Kim, A. M. Satanin, Y. S. Joe, and R. M. Cosby, *Phys. Rev. B* **60**, 10962 (1999).
26. Н. М. Шубин, В. В. Капаев, А. А. Горбацевич, *Письма в ЖЭТФ* **116**, 204 (2022).
27. J. Sanchez-Dehesa, J. A. Porto, F. Agullo-Rueda, and F. Meseguer, *J. Appl. Phys.* **73**, 5027 (1993).
28. G. N. Henderson, T. K. Gaylord, and E. N. Glytsis, *Proc. IEEE* **79**, 1643 (1991).
29. M. Asada, Y. Miyamoto, and Y. Suematsu, *IEEE J. Quantum Electron* **22**, 1915 (1986).
30. A. A. Gorbatsevich and V. V. Капаев, *Russ. Microelectron.* **36**, 1 (2007).
31. А. Ф. Садреев, А. С. Пилипчук, *Письма в ЖЭТФ* **100**, 664 (2014).
32. A. F. Sadreev, D. N. Maksimov, and A. S. Pilipchuk, *J. Phys. Condens. Matter* **27**, 295303 (2015).
33. M. L. L. De Guevara, F. Claro, and P. A. Orellana, *Phys. Rev. B* **67**, 195335 (2003).
34. A. A. Gorbatsevich and N. M. Shubin, *Phys. Rev. B* **96**, 205441 (2017).
35. F. Remacle, M. Munster, V. Pavlov-Verevkin, and M. Desouter-Lecomte, *Phys. Lett. A* **145**, 265 (1990).

Новый солитоноподобный режим генерации широкополосного терагерцового излучения лазерными импульсами с наклонными волновыми фронтами

С. В. Сазонов^{+*1)}, Н. В. Устинов[×]

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

^{*}Московский авиационный институт (Национальный исследовательский университет), 125993 Москва, Россия

[×]Объединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Россия

Поступила в редакцию 8 августа 2023 г.

После переработки 16 августа 2023 г.

Принята к публикации 16 августа 2023 г.

Проанализирован новый солитоноподобный режим генерации терагерцового излучения оптическим импульсом с наклонными волновыми фронтами. Показано, что принципиальное значение для формирования оптико-терагерцового солитона имеет дифракция оптического импульса. Наряду с солитонной частью излучения в синхронном режиме генерируется несолитонная широкополосная компонента терагерцового диапазона. Выявлены два условия синхронизма, названные нами “суперчеренковским” и “античеренковским”, при которых генерация наиболее эффективна. В первом случае оптико-терагерцовый солитон распространяется быстрее несолитонной терагерцовой компоненты. Во втором случае, напротив, несолитонная компонента является предвестником оптико-терагерцового солитона.

DOI: 10.31857/S1234567823180052, EDN: wpqbcf

1. Введение. На протяжении последних десятилетий все большую популярность приобретают вопросы, связанные с эффективной генерацией терагерцового излучения. Данное излучение находит нетривиальные приложения, связанные с безопасностью, восстановлением изображений, медициной, спектроскопией различных сред и т.д. [1–3].

Исследования взаимодействия терагерцового излучения с веществом представляют интерес также с точки зрения фундаментальной физической науки [4–7]. К настоящему времени интенсивности генерируемых в лабораторных условиях терагерцовых сигналов достигли настолько высоких значений [8, 9], что возникла настоятельная необходимость в развитии “нелинейной терагерцовой оптики” [4–7].

Один из наиболее эффективных способов генерации терагерцового излучения основан на эффекте оптического выпрямления субпикосекундных и фемтосекундных лазерных импульсов в квадратично-нелинейных средах [10–12]. Генерируемые этим способом терагерцовые импульсы обладают длительностью порядка одного периода электромагнитных колебаний. Таким образом, они относятся к разряду предельно коротких импульсов (ПКИ), являясь широкополосными в спектральном смысле. По

этой причине при теоретическом описании динамики данных импульсов нельзя использовать приближение медленно меняющейся огибающей (ММО) [13]. В свою очередь, входные оптические импульсы длительностью в десятки и сотни фемтосекунд можно с хорошим приближением считать квазимонохроматическими, обладающими определенной несущей частотой ω . Поэтому к ним вполне применимо приближение ММО.

Для эффективной генерации описанных выше терагерцовых сигналов важным является выполнение условия синхронизма черенковского типа $v_g \cos \theta = c/n_T$ [10–12]. Здесь c – скорость света в вакууме, v_g – групповая скорость света оптического импульса в рассматриваемой среде, n_T – показатель преломления данной среды в терагерцовом диапазоне, θ – угол между направлениями распространения задаваемого оптического импульса и генерируемого терагерцового сигнала.

Если угол θ отличен от нуля, имеем взаимно неколлинеарное распространение оптического и терагерцового сигналов. В этом случае генерируемый терагерцовый сигнал не испытывает постоянной подпитки энергией, так как отрывается от оптического импульса. Из-за этого обстоятельства эффективность генерации по энергии является невысокой, едва достигая значений порядка 10^{-6} [11, 12]. Увели-

¹⁾e-mail: sazonov.sergey@gmail.com

чить эффективность генерации можно, обеспечив коллинеарное распространение задаваемого и генерируемого сигналов, т.е. положив в черенковском условии $\theta = 0$. Тогда условие синхронизма приобретает вид $v_g = c/n_T$ и называется в теории нелинейных волн условием Захарова–Бенни (ЗБ) [14]. При выполнении условия ЗБ возможна нелинейная генерация длинноволновых импульсов коротковолновыми сигналами. Такая генерация проявляется себя в физике плазмы [15], гидродинамике [16], а также в физике магнитных сред [17] и длинных молекул [18].

Удовлетворить условию ЗБ при оптическом методе генерации терагерцового излучения можно в полупроводниковых кристаллах [19]. Однако в таких кристаллах весьма велико затухание электромагнитных волн терагерцового диапазона. Поэтому здесь не приходится говорить о высокой эффективности генерации. В диэлектрических кристаллах, обладающих высокой квадратичной нелинейностью, оптическая групповая скорость v_g , как правило, значительно превышает фазовую скорость c/n_T в терагерцовом диапазоне [11, 12]. Поэтому здесь удовлетворить условию ЗБ не представляется возможным.

Значительно повысить эффективность генерации в экспериментальных условиях удалось с помощью техники наклонных волновых фронтов оптического импульса [20–24]. В этом случае роль угла θ в черенковском условии играет угол между фазовыми и групповыми фронтами импульса (или, что то же самое, угол между фазовой и групповой скоростями данного оптического сигнала). В этом случае энергии оптического и генерируемого им широкополосного терагерцового сигнала переносятся в коллинеарном режиме. Как результат, эффективность генерации по энергии возрастает на несколько порядков [25].

В [26] было показано, что процесс генерации описывается нелинейной интегрируемой системой уравнений Ядзими–Ойкавы (ЯО), которая обладает солитонными решениями [27]. В приложении к случаю оптической генерации терагерцового излучения это означает формирование оптико-терагерцового солитона. В работе [28] аналогичное исследование проведено на основе обобщенной системы ЯО, учитывающей дисперсию терагерцовой компоненты. При этом, правда, в [28] предполагалось выполнение условия ЗБ, удовлетворить которому в реальных условиях, как отмечалось выше, представляется весьма проблематичным.

В работе [29] рассмотрен солитонный режим генерации при учете наклона волновых фронтов оптического импульса. Показано, что процесс генерации в этом случае описывается системой типа Ядзими–

Ойкавы–Кадамцева–Петвиашвили (ЯОКП). Так как при выводе волнового уравнения для терагерцового сигнала использовалось приближение однонаправленного распространения (ОР) [30–32], то угол наклона θ волновых фронтов предполагался малым. В то же время в экспериментальных условиях данное условие выполняется далеко не всегда. Например, для того, чтобы удовлетворить черенковскому условию в кристалле ниобата лития, необходимо использовать углы наклона $\theta \approx 67^\circ$ [11, 12]. Поэтому возникла необходимость исследования солитонного режима генерации широкополосного терагерцового сигнала с помощью квазимонохроматического оптического импульса, угол между фазовой и групповой скоростями которого является произвольным (не обязательно малым). Соответствующая система уравнений без использования приближения ОР к терагерцовой компоненте была выведена в работе [33] и названа системой Захарова–Буссинеска. Там же на основе одного из солитоноподобных решений исследован процесс генерации.

Настоящая работа посвящена физическому анализу нового солитоноподобного решения данной системы, описывающего генерацию терагерцового излучения.

Ниже, в настоящей работе, по отношению к одним и тем же объектам будут употребляться термины “солитон” и “солитоноподобное решение” без подчеркивания различий, связанных с математическим вопросом интегрируемости. Такая тенденция устойчиво просматривается в последние десятилетия в физической литературе.

2. Оптико-терагерцовые солитоны системы Захарова–Буссинеска. Пусть фазовая скорость оптического импульса с наклонными волновыми фронтами направлена вдоль оси z , которая перпендикулярна оптической оси x одноосного кристалла. Тогда система уравнений типа Захарова–Буссинеска для комплексной огибающей ψ электрического поля оптического импульса и поля E генерируемой терагерцовой компоненты имеет вид [33]

$$i \left(\frac{\partial \psi}{\partial z} + \frac{1}{v_g} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) = -\frac{\beta}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} + \alpha E \psi + \frac{c}{2n_\omega \omega} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial^2 E}{\partial z^2} - \frac{n_T^2}{c^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = \frac{\partial^2}{\partial t^2} (\mu E^2 + \sigma |\psi|^2) - \gamma \frac{\partial^4 E}{\partial t^4} - \frac{\partial^2 E}{\partial x^2}. \quad (2)$$

Здесь n_ω – оптический показатель преломления, $n_T = \sqrt{1 + 4\pi\chi_T}$ – терагерцовый показатель преломления, χ_T – терагерцовая линейная восприимчивость среды, $\beta = \partial v_g^{-1} / \partial \omega$ – параметр дисперсии груп-

повой скорости (ДГС) оптической компоненты, $\gamma = 2\pi(\partial^2\chi_T/\partial\omega^2)_{\omega=0}/c^2 > 0$ – параметр дисперсии терагерцовой компоненты, $\alpha = 4\pi\omega\chi^{(2)}(\omega; 0)v_g/c^2$, $\mu = 4\pi\chi^{(2)}(0; 0)/c^2$, $\sigma = 8\pi\chi^{(2)}(\omega; -\omega)/c^2$, $\chi^{(2)}(\omega_1; \omega_2)$ – нелинейная оптическая восприимчивость второго порядка, зависящая от частот ω_1 и ω_2 .

Здесь мы предполагаем, что как подаваемый на среду оптический импульс, так и генерируемый терагерцовый сигнал являются щелевыми. Поэтому в системе (1), (2) отсутствуют вторые производные по поперечной координате y .

Если в случае $\mu = \gamma = 0$ не учитывать дифракцию обоих компонент, то система (1), (2) переходит в одномерную систему уравнений Захарова [15, 17]. При $\psi = 0$ уравнение (1) обращается в тождество $0 = 0$, а уравнение (2) переходит в двумерное уравнение Буссинеска [34]. По этой причине в работе [33] система (1), (2) была названа системой Захарова–Буссинеска. Везде ниже по отношению к системе (1), (2) мы будем пользоваться данной терминологией.

В работе [33] было получено и детально проанализировано решение системы (1), (2) в виде оптикотерагерцового солитона с наклонными волновыми фронтами у оптической компоненты.

Здесь мы получили другое солитоноподобное решение данной системы, имеющее вид

$$\begin{aligned}\psi &= \psi_m e^{iqz} \operatorname{sech}\left(\frac{t - z'/v}{\tau}\right), \\ E &= -E_m \operatorname{sech}^2\left(\frac{t - z'/v}{\tau}\right),\end{aligned}\quad (3)$$

где ось z' , вдоль которой происходит перенос энергии обеих компонент, образует с осью z угол θ и связана с ней и оптической осью x преобразованием поворота

$$z' = z \cos \theta + x \sin \theta. \quad (4)$$

При этом для угла θ и амплитуд солитонных компонент имеем соответственно

$$\cos \theta = \frac{1}{\sqrt{1 + \eta}}, \quad (5)$$

$$\eta = \frac{n_\omega \omega v_g^2}{c}(\beta - \beta_c), \quad \beta_c = \frac{6\alpha\gamma}{\mu}, \quad (6)$$

$$\psi_m = \frac{1}{\tau} \sqrt{\frac{6\gamma}{\sigma\mu} \left(\frac{1}{v_B^2} - \frac{1}{v^2} \right)}, \quad E_m = \frac{6\gamma}{\mu\tau^2}. \quad (7)$$

Скорость v рассматриваемого солитона и скорость v_B солитона уравнения Буссинеска определяются соответственно выражениями

$$v = v_g \cos \theta, \quad \frac{1}{v_B} = \sqrt{\frac{n_T^2}{c^2} - \frac{4\gamma}{\tau^2}}, \quad (8)$$

а для нелинейной добавки q к волновому числу оптического импульса имеем

$$q = \frac{3\alpha\gamma}{\mu\tau^2}. \quad (9)$$

В качестве свободного параметра в решении (3)–(9) выступает длительность τ оптической компоненты. При этом длительность терагерцовой составляющей, как видно из (3), $\sim \tau/2$.

Важно заметить, что принципиальную роль в формировании оптикотерагерцового солитона (3)–(9) играет дифракция оптического импульса, описываемая последним слагаемым в правой части (1). Действительно, пренебрежение данной дифракцией равносильно формальному условию $n_\omega \rightarrow \infty$. В этом случае, как видно из (5) и (6), $\eta \rightarrow \infty$ и $\cos \theta = 0$. Тогда из первого выражения (8) имеем $v = 0$, что, согласно (3) и (7), приводит к исчезновению солитона.

Из (7) видно, что выражение для амплитуды терагерцовой компоненты рассматриваемого солитоноподобного решения совпадает с выражением для амплитуды солитона уравнения Буссинеска. В то же время скорость обеих компонент, распространяющихся в связанном режиме, фиксирована, не зависит от свободного параметра τ (см. (5), (6) и первое выражение (8)). Аналогичная ситуация имеет место для солитонов с наклонными волновыми фронтами, описываемых модифицированным нелинейным уравнением Шредингера [35].

Важно заметить, что в рассматриваемом решении фиксированным является также значение угла θ наклона волновых фронтов оптической компоненты (см. (5), (6)).

Терагерцовая компонента (3) солитона представляет собой униполярный (полуволновый) электромагнитный импульс. В настоящее время нелинейная оптика униполярных импульсов испытывает достаточно бурное развитие (см., например, обзор [36]).

В выражении (8) для скорости v_B второе (дисперсионное) слагаемое под знаком корня следует рассматривать как малую поправку к первому слагаемому. Поэтому здесь подкоренное выражение всегда положительно. Данное утверждение становится особенно очевидным, если принять, что зависимость восприимчивости от частоты в терагерцовом диапазоне имеет лоренцовский вид $\chi_T(\omega) = \frac{\omega_T^2 \chi_T}{\omega_T^2 - \omega^2}$, где ω_T – характерная резонансная частота терагерцового поглощения. Тогда $(\partial^2\chi_T(\omega)/\partial\omega^2)_{\omega=0} = 2\chi_T/\omega_T^2$. Следовательно,

$$\gamma = \frac{n_T^2 - 1}{c^2 \omega_T^2}. \quad (10)$$

Подставляя (10) во второе выражение (8), получим

$$\frac{1}{v_B} = \frac{n_T}{c} \sqrt{1 - 4 \frac{n_T^2 - 1}{(n_T \omega_T \tau)^2}}. \quad (11)$$

Метод учета дисперсии в виде разложения по временным производным от электрического поля справедлив при условии $(\omega_T \tau)^2 \gg 1$ [31, 32, 37]. Отсюда видно, что подкорненное выражение в (11) положительно.

После подстановки (10) во второе выражение (6) будем иметь

$$\beta_c = 6(n_T^2 - 1) \frac{\omega v_g}{c^2 \omega_T^2} \frac{\chi^2(\omega; 0)}{\chi^{(2)}(0; 0)}. \quad (12)$$

Из (5) и (6) следует обязательное условие

$$\beta - \beta_c > 0. \quad (13)$$

Аналогично условие положительности подкорненного выражения в первом выражении (7) с учетом (8) и (10) и (11) запишем в виде

$$\frac{\chi^{(2)}(\omega; -\omega)}{\chi^{(2)}(0; 0)} \left[1 - \left(\frac{c}{n_T v_g \cos \theta} \right)^2 - \frac{n_T^2 - 1}{(n_T \omega_T \tau)^2} \right] > 0. \quad (14)$$

В рассматриваемом нами процессе генерации должно выполняться установленное в [38] и продемонстрированное на примерах в [39] общее правило сохранения электрической площади импульса при его одномерном распространении. Так как оптическая компонента является квазимонохроматическим солитоном огибающей, то ее электрическая площадь всегда равна нулю. На входе в кристалл терагерцовая компонента отсутствует. Поэтому ее электрическая площадь также равна нулю. В силу правила сохранения электрической площади приходим к выводу, что данная величина и внутри кристалла должна быть равна нулю. Таким образом,

$$S_E \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} E dt = 0. \quad (15)$$

Площадь терагерцовой компоненты солитона (3) равна $S_E^{(s)} = -12\gamma/\mu\tau$ и не удовлетворяет условию (15). Следовательно, в процессе генерации должна породиться терагерцовая компонента несолитонного типа. В силу условия (15) площадь данной несолитонной компоненты должна быть равна $-S_E^{(s)} = +12\gamma/\mu\tau$. Вид этой сугубо терагерцовой компоненты можно установить, полагая в (2) $\psi = 0$. Учитывая, что $\partial^2/\partial z^2 + \partial^2/\partial x^2 = \partial^2/\partial z'^2 + \partial^2/\partial x'^2$ и

рассматривая распространение только вдоль оси z' , запишем

$$\frac{\partial^2 E}{\partial z'^2} - \frac{n_T^2}{c^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = \mu \frac{\partial^2}{\partial t^2} (E^2) - \gamma \frac{\partial^4 E}{\partial t^4}.$$

Используя теперь вполне уместное здесь приближение ОР [32, 37], придем к уравнению Кортевега–де Вриза (КдВ)

$$\frac{\partial E}{\partial z'} + \frac{n_T}{c} \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{c}{n_T} \mu E \frac{\partial E}{\partial t} - \frac{c}{2n_T} \gamma \frac{\partial^3 E}{\partial t^3} = 0. \quad (16)$$

Хорошо известно автомодельное (несолитонное) знакопеременное решение уравнения КдВ в виде промодулированного по частоте импульса [40, 41]. Это решение можно записать в виде [41] $E = z'^{2/3} f(\xi/z'^{1/3})$, где $\xi = t - n_T z'/c$, а f – функция, подчиняющаяся обыкновенному дифференциальному уравнению

$$\frac{c}{2n_T} \gamma \ddot{f} + \frac{\varphi}{3} \dot{f} - \frac{c}{n_T} f \dot{f} - \frac{2}{3} f = 0,$$

где точка над f обозначает производную по автомодельной переменной $\varphi = \xi/z'^{1/3}$.

Аutomодельное решение обладает весьма широким частотным спектром, обладающим свойствами суперконтинуума [28, 29].

Электрическая площадь данного автомодельного решения отлична от нуля. В нашем случае она равна площади солитона (3), взятой с противоположным знаком.

Важно заметить, что скорость данной несолитонной части терагерцового излучения равна линейной скорости c/n_T .

Рассмотрим конкретные примеры.

В кристалле типа KDP все три нелинейные восприимчивости второго порядка $\chi^{(2)}(0; 0)$, $\chi^{(2)}(\omega; 0)$ и $\chi^{(2)}(\omega; -\omega)$ положительны [42]. Поэтому неравенство (14) для этого случая можно переписать в виде условия “суперчеренковского” вида

$$v_g \cos \theta > v_B \approx c/n_T. \quad (17)$$

Так как здесь скорость $v = v_g \cos \theta$ оптико-терагерцового солитона больше, чем линейная скорость c/n_T , то упомянутая выше несолитонная часть генерируемого терагерцового излучения отстает от солитонной части, распространяющейся в связанном состоянии с оптическим импульсом.

Из (12) в этом случае видно, что $\beta_c > 0$. Тогда, согласно неравенству (13), ДГС оптического импульса обязательно должна быть положительной. Более того, положительное значение параметра β должно удовлетворять условию $\beta > \beta_c$. Взяв

$\chi^{(2)}(\omega; 0)/\chi^{(2)}(0; 0) \sim 0.1$ [42], $n_T \approx 2$, $\omega \sim 10^{15} \text{ с}^{-1}$, $\omega_T \sim 10^{14} \text{ с}^{-1}$, $v_g \sim c$, будем иметь $\beta_c \sim 10^{-24} \text{ с}^2/\text{см}$. Полагая также $n_\omega \sim 1$, $\beta - \beta_c \sim 0.1$, найдем из (6) и (12) $\eta \sim 1$, что после подстановки в (5) может дать вполне разумные значения для угла наклона θ , удовлетворяющие “суперчеренковскому” условию (17). Для более четких выводов здесь необходимо использовать не оценочные, а точные значения приведенных выше параметров.

В качестве другого примера рассмотрим одноосный кристалл ниобата лития. Здесь $\chi^{(2)}(0; 0) > 0$, $\chi^{(2)}(\omega; 0) < 0$ и $\chi^{(2)}(\omega; -\omega) < 0$ [42]. При этом $\chi^{(2)}(0; 0) \sim 10^{-6} \text{ CGSE}$, $|\chi^{(2)}(\omega; 0)| \sim |\chi^{(2)}(\omega; -\omega)| \sim 10^{-7} \text{ SGSE}$. Тогда из (8), (11) и (14) будем иметь “античеренковское” условие

$$v_g \cos \theta < v_B \approx c/n_T. \quad (18)$$

Здесь, как легко видеть, несолитонная часть терагерцового излучения распространяется быстрее оптико-терагерцового солитона, являясь его предвестником.

Как видно из (12), в этом случае $\beta_c < 0$. Тогда условие (13) выполняется при любых положительных значениях параметра ДГС β . При отрицательной ДГС абсолютное значение параметра β должно удовлетворять условию $|\beta| < |\beta_c|$. В частности, данное неравенство удовлетворяется при $\beta = 0$. Тогда приходим к “бездисперсионным” солитонам, которые имеют место также в решении системы (1), (2) другого типа, найденного в [33]. Из (5) следует, что $\eta = \tan^2 \theta$. Используя также первое выражение (6), будем иметь

$$\beta_c = \beta - \frac{c}{n\omega v_g^2} \tan^2 \theta. \quad (19)$$

Таким образом, величина β_c выполняет роль эффективного параметра ДГС оптического импульса. Второе слагаемое в правой части (19) появляется благодаря дифракции оптической компоненты (см. последнее слагаемое в правой части (1)). Следовательно, дифракция вносит вклад в эффективную ДГС благодаря наклону волновых фронтов оптического импульса. Дифракционное искривление фазовых волновых фронтов, распространяющихся вдоль оси z , приводит к уширению оптического волнового пакета в проекции на ось z' , что равносильно наличию эффективной дисперсии [35]. Это подтверждается выражением (19).

Численные оценки параметров $|\beta_c|$ и η для кристалла ниобата лития по порядку величины совпадают с соответствующими значениями, полученными выше для кристалла типа KDP.

Очевидно, что оптико-терагерцовый солитон формируется на дистанциях порядка дисперсионной длины $l_d \sim \tau^2/2|\beta_c|$ оптического импульса. Подставив сюда приведенные выше оценочные значения, найдем $l_d \sim 10^{-2} \text{ см}$. Следовательно, описанные выше сценарии генерации солитонной и несолитонной частей терагерцового излучения вполне можно наблюдать в кристаллах с характерным размером в несколько миллиметров.

Примем, что поперечные размеры оптического и терагерцового импульсов $D \sim 1 \text{ мм}$. Тогда дифракционная длина терагерцового сигнала $l_D \sim D^2/c\tau \sim 10 \text{ см}$. Это значительно превосходит предполагаемые размеры кристаллического образца. Поэтому формирование оптико-терагерцового солитона представляется здесь вполне возможным в реальных условиях.

Характерную длину волны λ_T генерируемого широкополосного терагерцового сигнала можно оценить как $\lambda_T \sim c\tau$. Подставив сюда $\tau \sim 10^{-13} \text{ с}$, будем иметь $\lambda_T \sim 10^{-2} - 10^{-3} \text{ см}$. Таким образом, $\lambda_T \ll D$. Данное условие является важным аргументом в пользу принятого при записи исходной системы (1), (2) параксиального приближения.

Легко видеть, что значения интенсивностей оптической I_ω и терагерцовой I_T компонент рассмотренного здесь солитона можно оценить с помощью выражений вида

$$I_\omega \sim \frac{c}{4\pi(\omega_T\tau)^2 |\chi^{(2)}(0; 0)\chi^{(2)}(\omega; -\omega)|},$$

$$I_T \sim \frac{c}{4\pi(\omega_T\tau)^4 |\chi^{(2)}(0; 0)|^2}.$$

Отсюда для эффективности генерации имеем

$$\frac{I_T}{I_\omega} \sim \frac{1}{(\omega_T\tau)^2} \left| \frac{\chi^{(2)}(0; 0)}{\chi^{(2)}(\omega; -\omega)} \right|.$$

Подставив сюда приведенные выше значения присутствующих параметров и полагая $\tau \sim 10^{-13} \text{ с}$, получим $I_\omega \sim 10^{12} \text{ Вт/см}^2$, $I_T \sim 10^{11} \text{ Вт/см}^2$ и $I_T/I_\omega \sim 10^{-1}$.

Таким образом, эффективность генерации в проанализированном здесь солитоноподобном режиме может достигать порядка десяти процентов. Это значительно выше, чем эффективность, достигаемая на основе солитонного режима, проанализированного в [33]. Аналогичное замечание касается также интенсивностей оптической и терагерцовой компонент.

Важным отличием проанализированного здесь решения от солитоноподобного решения, полученного в [33], является то, что здесь длительность генерируемого терагерцового сигнала оказывается в два

раза меньшим длительности оптического импульса (см. (3)). Таким образом, терагерцовый сигнал полностью захватывается оптическим импульсом в синхронном режиме распространения. Это обеспечивает хорошую подпитку генерируемого сигнала за счет энергии оптического импульса. В солитоноподобном решении, найденном в работе [33], длительности обоих компонент являются одинаковыми. Таким образом захват терагерцового сигнала оптическим импульсом не является столь эффективным, как в рассмотренном здесь случае. Поэтому эффективность генерации является не такой высокой.

3. Заключительные замечания. Таким образом, в настоящей работе получено новое солитоноподобное решение системы (1), (2) типа Захарова–Буссинеска. Важно заметить, что принципиальная роль в формировании данного солитона принадлежит дифракции. На основе солитоноподобного решения проанализирован процесс генерации терагерцового излучения оптическим импульсом с наклонными волновыми фронтами в кристалле, обладающем квадратичной оптической нелинейностью. С помощью правила сохранения электрической площади показано, что помимо солитонной части терагерцового излучения порождается также несолитонная (автомоделная) часть. Угол наклона волновых фронтов оптической компоненты солитона однозначно определяется параметрами кристалла и не может иметь произвольное значение.

В зависимости от знаков различных нелинейных восприимчивостей второго порядка, зависящих от несущей частоты оптического импульса, могут быть реализованы режимы при “суперчеренковском” (17) и “античеренковском” (18) условиях синхронизма. В первом случае скорость оптико-терагерцового солитона больше скорости несолитонной части генерируемого терагерцового излучения. Во втором случае, напротив, несолитонная часть является, своего рода, предвестником оптико-терагерцового солитона.

Заметим, что проанализированный в работе [33] солитоноподобный режим генерации наиболее эффективно реализуется при строгом выполнении черенковского условия.

Открытым пока остается вопрос устойчивости найденного здесь солитоноподобного решения. Кроме того, требует исследования вопрос о том, при каких входных условиях могут реализовываться солитоноподобные решения, найденные здесь и в работе [33]. Возможно, одной из подсказок здесь может служить то, что интенсивности оптической и терагерцовой компонент найденного здесь солитона на

два–три порядка больше соответствующих интенсивностей солитона, проанализированного в работе [33]. Более строгого и внятного ответа следует ожидать от численных экспериментов с системой (1), (2), которые мы планируем провести отдельно.

1. B. Fergusson and X.-C. Zhang, *Nat. Mater.* **1**, 26 (2002).
2. О.П. Черкасова, Д.С. Сердюков, А.С. Ратуньяк, Е.Ф. Немова, Е.Н. Козлов, Ю.В. Шидловский, К.И. Зайцев, В.В. Тучин, *Оптика и спектроскопия* **128**, 852 (2020) [O.P. Cherkasova, D.S. Serdyukov, A.S. Ratushnyak, E.F. Nemova, E.N. Kozlov, Yu.V. Shidlovskii, K.I. Zaytsev, and V.V. Tuchin, *Opt. Spectrosc.* **128**, 855 (2020)].
3. A. Irizawa, S. Lupi, and A. Marcelli, *Condens. Matter.* **6**, 23 (2021).
4. С.В. Сазонов, *ЖЭТФ* **146**, 483 (2014) [S.V. Sazonov, *JETP* **119**, 423 (2014)].
5. K. Dolgaleva, D.V. Materikina, R.W. Boyd, and S.A. Kozlov, *Phys. Rev. A* **92**, 023809 (2015).
6. S.V. Sazonov and N.V. Ustinov, *Phys. Rev. A* **98**, 063803 (2018).
7. M. Zhukova, M. Melnik, I. Vorontsova, A. Tsyupkin, and S. Kozlov, *Photonics* **98**, 7 (2020).
8. M. Shalaby and C.P. Hauri *Nature Commun.* **6**, 5976 (2015).
9. X.-C. Zhang, A. Shkurinov, and Y. Zhang, *Nature Photon.* **11**, 16 (2017).
10. У.А. Абдуллин, Г.А. Ляхов, О.В. Руденко, А.С. Чиркин, *ЖЭТФ* **66**, 1295 (1974) [U.A. Abdullin, G.A. Lyakhov, O.V. Rudenko, and A.S. Chirkin, *Sov. Phys. JETP* **39**, 633 (1974)].
11. Д.А. Багдасарян, А.О. Макарян, П.С. Погосян, *Письма в ЖЭТФ* **37**, 498 (1983) [D.A. Bagdasaryan, A.O. Makaryan, and P.S. Pogosyan, *JETP Lett.* **37**, 594 (1983)].
12. D.H. Auston, K.P. Cheung, J.A. Valdmanis, and D.A. Kleinman, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1555 (1984).
13. С.А. Ахманов, В.А. Выслоух, А.С. Чиркин, *Оптика фемтосекундных лазерных импульсов*, Наука, М. (1988).
14. Р. Додд, Дж. Эйлбек, Дж. Гиббон, Х. Моррис, *Солитоны и нелинейные волновые уравнения*, Мир, М. (1988) [R.K. Dodd, J.C. Eilbeck, J. Gibbon, and H.C. Morris, *Solitons and Nonlinear Wave Equations*, Academic Press, N.Y. (1982)].
15. В.Е. Захаров, *ЖЭТФ* **62**, 1745 (1972) [V.E. Zakharov, *Sov. Phys. JETP* **35**, 908 (1972)].
16. D.J. Benney, *Stud. Appl. Math.* **56**, 81 (1977).
17. В.С. Львов, *Нелинейные спиновые волны*, Наука, М. (1987).
18. А.С. Давыдов, *УФН* **138**, 603 (1982) [A.S. Davydov, *Sov. Phys.-Uspekhi* **25**, 898 (1982)].

19. C. P. Hauri, C. Ruchert, C. Vicario, and F. Ardana, *Appl. Phys. Lett.* **99**, 161116 (2011).
20. J. Hebling, G. Almasi, I. Z. Kozma, and J. Kuhl, *Opt. Express* **10**, 1161 (2002).
21. А. Г. Степанов, А. А. Мельников, В. О. Компанец, С. В. Чекалин, *Письма в ЖЭТФ* **85**, 279 (2007) [A. G. Stepanov, A. A. Mel'nikov, V. O. Kompanets, and S. V. Chekalin, *JETP Lett.* **85**, 227 (2007)].
22. M. I. Bakunov, S. B. Bodrov, and V. V. Tsarev, *J. Appl. Phys.* **104**, 073105 (2008).
23. J. Hebling, K.-L. Yeh, M. C. Hoffmann, B. Barta, and K. A. Nelson, *JOSA B* **25**, 6 (2008).
24. G. Kh. Kitaeva, *Laser Phys. Lett.* **5**, 559 (2008).
25. S. B. Bodrov, A. N. Stepanov, M. I. Bakunov, V. Shishkin, and I. E. Ilyakov, *Opt. Express* **17**, 1871 (2009).
26. С. В. Сазонов, А. Ф. Соболевский, *Письма в ЖЭТФ* **75**, 746 (2002) [S. V. Sazonov and A. F. Sobolevskii, *JETP Lett.* **75**, 621].
27. N. Yajima and M. Oikawa, *Progr. Theor. Phys.* **56**, 1719 (1976).
28. А. Н. Бугай, С. В. Сазонов, *Письма в ЖЭТФ* **87**, 470 (2008) [A. N. Bugai and S. V. Sazonov, *JETP Lett.* **87**, 403 (2008)].
29. С. В. Сазонов, Н. В. Устинов, *Письма в ЖЭТФ* **114**, 437 (2021) [S. V. Sazonov and N. V. Ustinov, *JETP Lett.* **114**, 380 (2021)].
30. P. J. Caudrey, J. C. Eilbeck, J. D. Gibbon, and R. K. Bullough, *J. Phys. A: Math., Nucl. Gen.* **6**, L53 (1973).
31. Э. М. Беленов, А. В. Назаркин, *Письма в ЖЭТФ* **100**, 252 (1990) [E. M. Belenov and A. V. Nazarkin, *JETP Lett.* **51**, 288 (1990)].
32. Э. М. Беленов, А. В. Назаркин, В. А. Ущиповский, *ЖЭТФ* **100**, 762 (1991) [E. M. Belenov, A. V. Nazarkin, and V. A. Ushchapovskii, *JETP* **73**, 57 (1991)].
33. S. V. Sazonov and N. V. Ustinov, *Laser Phys. Lett.* **19**, 025401 (2022).
34. Дж. Уизем, *Линейные и нелинейные волны*, Мир, М. (1977) [G. B. Whitham, *Linear and Nonlinear Waves*, John Wiley & Sons, Inc., N.Y. 1999].
35. С. В. Сазонов, *Письма в ЖЭТФ* **115**, 207 (2022) [S. V. Sazonov, *JETP Lett.* **115**, 181 (2022)].
36. Р. М. Архипов, М. В. Архипов, А. А. Шимко, А. В. Пахомов, Н. Н. Розанов, *Письма в ЖЭТФ* **110**, 9 (2019) [R. M. Arkhipov, M. V. Arkhipov, A. A. Shimko, A. V. Pakhomov, and N. N. Rosanov, *JETP Lett.* **110**, 15 (2019)].
37. С. В. Сазонов, А. Ф. Соболевский, *ЖЭТФ* **123**, 1160 (2003) [S. V. Sazonov and A. F. Sobolevskii, *JETP* **96**, 1019 (2003)].
38. Н. Н. Розанов, *Оптика и спектроскопия* **107**, 761 (2009) [N. N. Rosanov, *Optics and Spectroscopy* **107**, 721 (2009)].
39. Н. Н. Розанов, Р. М. Архипов, М. В. Архипов, *УФН* **188**, 1347 (2018) [N. N. Rosanov, R. M. Arkhipov, and M. V. Arkhipov, *Phys.-Uspekhi* **61**, 1227 (2018)].
40. В. Е. Захаров, С. В. Манаков, С. П. Новиков, Л. П. Питаевский, *Теория солитонов: метод обратной задачи*, Наука, М. (1980) [V. E. Zakharov, S. V. Manakov, S. P. Novikov, and L. P. Pitaevskii, *Theory of Solitons: The Inverse Scattering Method*, Consultants Bureau, N.Y. (1984)].
41. Дж. Лэм, *Введение в теорию солитонов*, Мир, М. (1983) [G. L. Lamb, *Elements of Soliton Theory*, John Wiley & Sons, N.Y. (1980)].
42. D. N. Nikogosyan, *Nonlinear Optical Crystals: A Complete Survey*, Springer, N.Y. (2005).

Влияние закона сохранения энергии, размерности пространства и симметрии задачи на сингулярности поля вектора Пойнтинга

М. И. Трибельский¹⁾

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

Центр фотоники и двумерных материалов, МФТИ, 141700 Долгопрудный, Россия

Поступила в редакцию 31 мая 2023 г.

После переработки 17 августа 2023 г.

Принята к публикации 18 августа 2023 г.

Дается миниобзор последних достижений автора в классификации особых точек поля вектора Пойнтинга в полях сложной конфигурации. Выявлена глубокая связь между топологической структурой силовых линий этого поля и законом сохранения энергии, симметрией задачи и размерностью пространства.

DOI: 10.31857/S1234567823180064, EDN: wovfvw

Введение. Хорошо известно, что качественно топологическая структура любого поля в значительной степени определяется типом и положением его особых точек. Разумеется, это справедливо и для электромагнитного поля. По этой причине, а также в связи с колоссальным развитием экспериментальных возможностей по созданию и изучению световых пучков сложной конфигурации, исследование особых точек электромагнитного поля привлекает пристальное внимание специалистов, см., например, [1–6] и цитируемую там литературу.

Сказанное в полной мере относится к полю вектора Пойнтинга $\mathbf{S}$. В частности, сингулярности этого поля оказываются важны при резонансном рассеянии света субволновыми объектами, например, при рассеянии света наночастицами, так как именно топологическая структура поля вектора Пойнтинга определяет сложную циркуляцию энергии в окрестности рассеивающей свет частицы и в ней самой, а дивергенция этого поля — диссипацию электромагнитной энергии в такой частице.

Помимо чисто академического интереса эти вопросы имеют большое практическое значение для различных нанотехнологий, так как управляемое на наномасштабах энерговыделение представляет уникальную возможность осуществить локальное воздействие на различные материалы. Поле вектора Пойнтинга также дает вклад в пондеромоторные силы [4], который важно знать для манипуляции нанообъектами в этой области. Подробное обсуждение этого вопроса содержится в обзоре [7].

При этом, экспериментальное измерение поля вектора Пойнтинга представляет собой весьма трудную задачу [8], а в практически важном случае поля внутри твердотельного рассеивающего объекта оказывается невозможным. В такой ситуации теоретическое описание этого поля является единственным инструментом его исследования.

Начиная с пионерской работы Бохрена [9], такие исследования проводилось многими авторами [10–19]. В частности, детальная классификация особых точек поля вектора Пойнтинга была сделана в работе [2].

Однако, абсолютное большинство исследований относится к изучению особенностей в полях сложных конфигурации. Здесь было получено много интересных, важных и часто неожиданных результатов. Среди них — сингулярности непараксиальных бесселевых пучков [4]; сингулярности в суперосциллирующих полях [20]; сингулярности, обусловленные интерференцией с тороидальными модами [21]; возникновение обратного (по отношению к падающей волне) потока энергии вблизи оси остро сфокусированного вихревого пучка [22, 23] и др. Как правило, теоретическое описание этих особенностей связано с громоздкими вычислениями, привлечением таких понятий, как топологический заряд [24, 25], геометрическая фаза Панчаратнама–Берри [26, 27] и т. п.

Между тем, описание в рамках традиционной классификации Пуанкаре (седло, узел, и т. п.) простейшей ситуации спонтанного образования сингулярностей при рассеянии плоской линейно поляризованной электромагнитной волны, не требующее громоздких вычислений и введения новых понятий, да-

¹⁾e-mail: mitribel@gmail.com

леко не закончено. Конкретно, тому факту, что поле вектора Пойнтинга удовлетворяет закону сохранения энергии, который вкупе с размерностью пространства и симметрией задачи накладывает значительные ограничения как на тип особых точек, так и на бифуркационную картину их рождения (аннигиляции), до недавнего времени не уделялось достаточного внимания. Частично этот пробел был восполнен недавними результатами автора [28–30], краткое обсуждение которых приводится ниже. Формат мини-обзора не позволяет здесь представить сколь-нибудь полное обсуждение других аспектов проблемы. Читатель, интересующийся такими аспектами, адресуется к цитируемым выше работам, а также к имеющимся там литературным ссылкам.

Отметим также, что, с точки зрения теоретического описания проблемы, решение уравнений Максвелла определяет поля $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$. Что касается поля $\mathbf{S}$, то оно *вычисляется* на основании найденных полей $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$, и в этом смысле является вторичным. Как будет видно из дальнейшего, это обстоятельство играет существенную роль в понимании физического смысла сингулярностей такого поля.

Работа имеет следующую структуру: в разделе I дается формулировка задачи; в разделе II рассматриваются сингулярности в недиссипативной среде, возникающие при рассеянии на сфере (II A) и цилиндре (II B); в разделе III обсуждается влияние диссипативных эффектов; раздел IV посвящен эффектам, связанным с контролируемым нарушением симметрии; в разделе V приводятся заключение и благодарности, а также формулируются некоторые нерешенные задачи.

I. Постановка задачи. Хорошо известно, что поведение поля в окрестности особой точки определяется локальными топологическими характеристиками данной точки и слабо зависит от глобального поведения этого поля вдали от нее. По этой причине обсуждаемая ниже феноменологическая теория является универсальной. Она нечувствительна к изменению геометрии рассеиваемого пучка, а также формы и оптических характеристик рассеивающего объекта. Однако конкретные примеры, иллюстрирующие эту теорию, основаны на расчетах, использующих точные решения соответствующих задач рассеяния плоской линейно поляризованной электромагнитной волны сферой радиуса R или бесконечным круговым цилиндром с радиусом сечения R . Эти решения хорошо известны, см., например, [31]. Такой подход позволил сравнительно легко как находить сами особые точки, так и контролировать точность расчетов, которая выбиралась достаточной для уве-

ренного разрешения всех необходимых деталей обсуждаемых явлений.

Магнитная проницаемость рассеивающего тела μ считается равной единице (что соответствует оптическим частотам); а его диэлектрическая проницаемость $\varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon'' = \text{const}$, где $\varepsilon'' > 0$. При необходимости полученные результаты легко обобщаются на случай отличного от единицы μ и/или $\varepsilon'' < 0$ (активное рассеивающее тело с инверсной населенностью).

При теоретическом описании задач рассеяния поле вне рассеивающего объекта обычно представляется в виде суммы поля падающей волны и поля излучения, рассеянного объектом. Во избежание недоразумений подчеркнем, что всюду в настоящей работе под полями $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$ понимаются полные поля, равные указанной сумме.

Вектор Пойнтинга предполагается действительным и определяется обычным образом [32]:

$$\mathbf{S} = \frac{c}{16\pi} ([\mathbf{E}^* \mathbf{H}] + [\mathbf{E} \mathbf{H}^*]), \quad (1)$$

где c – скорость света в вакууме, а звездочка означает комплексное сопряжение. Заметим, однако, что в некоторых случаях целесообразно вводить комплексный вектор Пойнтинга $\hat{\mathbf{S}} = \frac{c}{8\pi} [\mathbf{E}^* \mathbf{H}]$, мнимая часть которого имеет смысл осциллирующего потока запасенной энергии [33]. Эта величина играет важную роль в некоторых задачах взаимодействия света с веществом [34–40]. Как правило, обсуждаемые ниже результаты, полученные для действительного $\mathbf{S}$, легко обобщаются на случай комплексного $\hat{\mathbf{S}}$.

Структура поля вектора Пойнтинга описывается соответствующими силовыми линиями, которые по аналогии с гидродинамикой мы также будем называть линиями тока. Касательные к этим линиям в каждой их точке соответствуют направлению вектора $\mathbf{S}$ в этой точке. Уравнение линий тока удобно задавать в параметрическом виде $\mathbf{r} = \mathbf{r}(t)$. Здесь t – безразмерный параметр, вообще говоря, никак не связанный с истинным временем. При таком представлении “скорость” $d\mathbf{r}/dt$ будет направлена по касательной к линии тока, т.е. пропорциональна вектору $\mathbf{S}(\mathbf{r})$. За счет надлежащего масштабирования t соответствующий коэффициент пропорциональности всегда можно обратить в единицу. Тогда уравнение, определяющее линии тока, приобретает вид:

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{S}(\mathbf{r}). \quad (2)$$

Далее, введем безразмерные переменные, нормируя координату $\mathbf{r}$ на R , а поля $\mathbf{E}$, $\mathbf{H}$ и $\mathbf{S}$ на соответствующие значения в падающей волне. Поскольку

езде ниже будут использоваться только безразмерные переменные, мы сохраним за ними те же обозначения, так как это не может привести к недоразумениям.

Сингулярности вектора $\mathbf{S}(\mathbf{r})$, как и любого векторного поля, соответствуют точкам пересечения его силовых линий. Поскольку, как уже отмечалась, касательные к силовым линиям определяют направление вектора $\mathbf{S}(\mathbf{r})$, то их пересечение в некоторой точке $\mathbf{r}_s$ означает, что вектор $\mathbf{S}(\mathbf{r}_s)$ не определяется однозначно. Единственный способ совместить этот факт со следующей из фундаментальных физических принципов однозначностью поля $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ – потребовать, чтобы $\mathbf{S}(\mathbf{r}_s) = 0$. Очевидно, что для этого существуют три возможности: (а) $\mathbf{E}(\mathbf{r}_s) = 0$, (б) $\mathbf{H}(\mathbf{r}_s) = 0$ и (с) $\mathbf{S}(\mathbf{r}_s) = 0$, когда при этом ни (а) ни (б) не выполняются (этот случай соответствует образованию стоячей волны). В соответствии с терминологией, введенной в работе [2], мы будем называть такие особые точки сингулярностями *E-типа* (E-induced), *H-типа* (H-induced) и *поляризационного типа* (polarization-induced), соответственно. При этом оба первых типа удобно также называть *полевыми сингулярностями* (field-induced). Чтобы отличать эту классификацию от стандартной классификации Пуанкаре (узел, фокус, и т.п.), мы будем называть ее электромагнитной.

Важно подчеркнуть, что если в полевых сингулярностях, по понятным причинам, обнуляется все векторное произведение $[\mathbf{E}^* \mathbf{H}]$, то поляризационные сингулярности требуют обнуление только его действительной части. Вследствие этого сингулярные точки полевого типа для действительной и мнимой частей комплексного вектора Пойнтинга $\hat{\mathbf{S}}$ совпадают, а сингулярности поляризационного типа, вообще говоря, нет.

II. Недиссипативный предел. Заметим, что стандартная постановка задачи о рассеянии света материальным объектом, при которой падающая волна приходит из бесконечности, а рассеянная – уходит на бесконечность [31], возможна только если это тело окружено недиссипативной средой, частным случаем которой является вакуум. В противном случае падающая волна затухает, не доходя до рассеивающего объекта. По этой причине, все сингулярности, находящиеся вне рассеивающего тела, должны рассматриваться в недиссипативной среде, так что случай отсутствия диссипации в окрестности сингулярности является важным для описания рассеяния любой, даже сильно поглощающей частицей. Поскольку задача рассеяния для частицы в среде с произвольным значением $\epsilon > 0$ сводится к случаю рассеяния в вакууме тривиальным масштабным преобразованием

ем [31], не нарушая общности рассмотрения можно считать, что диэлектрическая проницаемость окружающей среды равна единице, что и будет предполагаться в дальнейшем.

Сфера. Анализ сингулярностей начнем с обсуждения случая рассеяния света конечным объектом, имеющим плоскость симметрии. При этом будем предполагать, что плоскость поляризации совпадает с плоскостью симметрии. Простейшим примером является рассеяние сферой. Подчеркнем, однако, что, хотя приводимые ниже конкретные результаты связаны именно с таким примером, это обусловлено исключительно удобством вычислений. Развита же феноменологическая теория справедлива для тела произвольной формы, обладающего плоскостью симметрии.

В соответствии с традиционной трактовкой задачи [31] выберем систему координат, в которой ось z направлена вдоль волнового вектора падающей волны $\mathbf{k}$, а ось x совпадает с направлением осцилляций вектора $\mathbf{E}$ этой волны. Тогда вектор $\mathbf{H}$ падающего электромагнитного излучения оказывается параллельным оси y .

В общем случае линии тока вектора Пойнтинга в этой задаче существенно трехмерные. Однако из симметрии следует, что плоскость xz является инвариантной – линии тока, принадлежащие этой плоскости, двумерны. Если рассеивающее тело, помимо зеркальной симметрии по отношению к плоскости xz , симметрично и по отношению к плоскости yz (как это имеет место для сферы), то и эта плоскость будет инвариантна. Тем не менее, хотя какие-либо ограничения на положения сингулярностей поля $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ неизвестны (и есть основания ожидать, что такие ограничения не существуют), в настоящее время при рассеянии на сфере обнаружены только сингулярности, принадлежащие инвариантной плоскости, параллельной плоскости поляризации [10–14, 16, 28, 29], к обсуждению которых мы и переходим.

Выбирая начало координат в сингулярной точке, учитывая, что в силу инвариантности плоскости xz компонента $S_y(x, 0, z) \equiv 0$, и разлагая компоненты вектора $\mathbf{S}$ в ряд по малым отклонениям от сингулярности, получаем, что в этом случае уравнение (2) приобретает вид:

$$\frac{dx}{dt} = S_x(x, y, z) \approx s_x^{(x)} x + s_x^{(y)} y + s_x^{(z)} z, \quad (3)$$

$$\frac{dy}{dt} = S_y(x, y, z) \approx s_y^{(y)} y, \quad (4)$$

$$\frac{dz}{dt} = S_z(x, y, z) \approx s_z^{(x)} x + s_z^{(y)} y + s_z^{(z)} z, \quad (5)$$

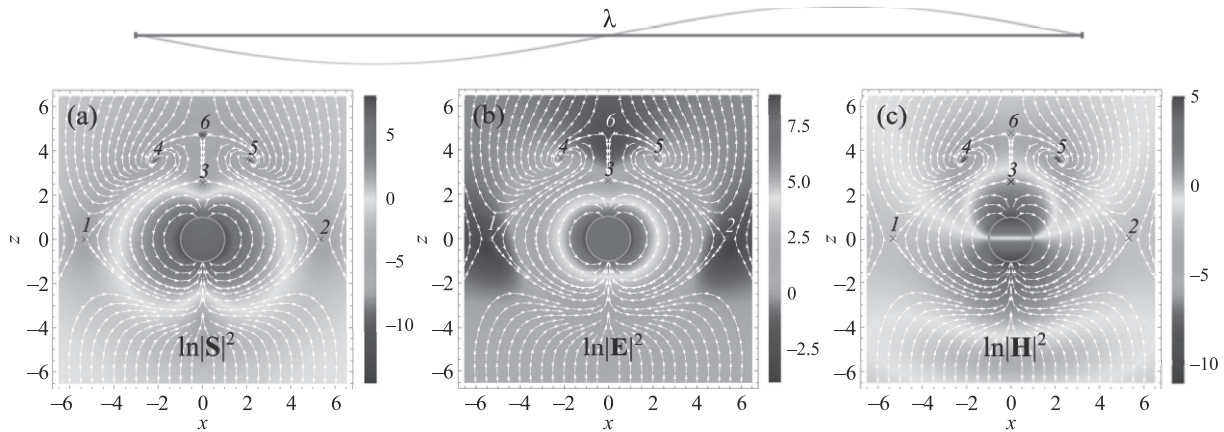


Рис. 1. (Цветной онлайн) Точное решение уравнений Максвелла. Рассеяние сферой плоской линейно поляризованной волны в вакууме. Линии тока поля вектора Пойнтинга, а также значения логарифма квадрата модуля вектора Пойнтинга (а), электрического (б) и магнитного (с) полей в инвариантной плоскости xz (показаны цветом). Плоскость поляризации совпадает с плоскостью рисунка. Волновой вектор $\mathbf{k}$ падающего излучения параллелен оси z . Параметр размера $q = 0.3$; $\varepsilon = -2.17$. Поверхность сферы изображена сплошной зеленой линией. Из симметрии задачи следует, что структуры всех полей симметричны относительно плоскости $x = 0$, перпендикулярной плоскости рисунка. Крестики (х) отмечают положение особых точек поля вектора Пойнтинга. Точки 4 и 5 – фокусы, остальные сингулярности – седла; $|\mathbf{S}|^2 = 0$ во всех особых точках. Характерный масштаб структуры полей значительно меньше длины волны излучения, размер которой изображен в верхней части рисунка [28]. См. подробности в тексте

где $s_{x_n}^{(x_m)} \equiv \left(\frac{\partial S_{x_n}}{\partial x_m} \right)_s$. Здесь индекс s означает, что производная берется в сингулярной точке, и x_m обозначает любую из трех компонент вектора $\mathbf{r}$.

Стандартным образом, представляя решение системы уравнений (3)–(5) в виде $x_n = x_{n0} \exp(\kappa t)$, $x_{n0} = \text{const}_n$ и приравнявая детерминант полученной системы алгебраических уравнений нулю, находим корни характеристического уравнения

$$\kappa_{1,2} = \gamma \pm \alpha, \quad \kappa_3 = s_y^{(y)}, \quad (6)$$

$$\gamma = \frac{s_x^{(x)} + s_z^{(z)}}{2}, \quad \alpha = \frac{\sqrt{\left(s_x^{(x)} - s_z^{(z)}\right)^2 + 4s_x^{(z)}s_z^{(x)}}}{2}. \quad (7)$$

Отметим, что κ_3 всегда является действительной величиной, что в окрестности рассматриваемой сингулярности соответствует экспоненциальному отталкиванию линий тока от инвариантной плоскости при $\kappa_3 > 0$ и их экспоненциальному приближению к ней при $\kappa_3 < 0$.

Воспользуемся теперь законом сохранения энергии, согласно которому $-\text{div } \mathbf{S} = Q$, где Q – плотность диссипируемой электромагнитной энергии. Поскольку сейчас мы рассматриваем недиссипативный случай, то $Q = 0$. Что же касается $\text{div } \mathbf{S}$, то в рассматриваемом приближении $\text{div } \mathbf{S} \approx s_x^{(x)} + s_y^{(y)} + s_z^{(z)}$. В этом случае из выражений (6)–(7) следует, что κ_3 и γ имеют противоположные знаки. Иными словами, если в инвариантной плоскости поток энергии

направлен в сторону сингулярности, то в перпендикулярном направлении линии тока уходят от сингулярной точки, и наоборот. Это свойство согласуется с интегральной формой закона сохранения энергии, согласно которой в стационарной задаче в недиссипативной среде поток энергии через любую замкнутую поверхность (в том числе и через поверхность, окружающую сингулярность) должен обнуляться.

Обсудим теперь типы сингулярностей, принадлежащих инвариантной плоскости. В качестве примера, на рис. 1 приведена структура поля, возникающая в этом случае при $\varepsilon = -2.17$ и параметре размера $q \equiv kR = 0.3$, где $k = \omega/c$ – волновое число падающей волны в вакууме, а c – скорость света.

На рисунке 1а идентифицируются шесть особых точек. В инвариантной плоскости xz две из них (под номерами 4 и 5) являются устойчивыми фокусами, а остальные – седлами. Подчеркнем, что из сказанного в предыдущем параграфе следует, что в трехмерном пространстве (3D) фокусы 4, 5 неустойчивы по перпендикулярному к инвариантной плоскости направлению, т. е. являются сложными особыми точками седло-фокус.

Вычисления показывают, что во всех особых точках вектор Пойнтинга обнуляется, как и должно быть. Для того чтобы понять, к какому электромагнитному типу (полевого или поляризационному) принадлежат эти сингулярности, мы наложили ли-

нии тока рис. 1а на профиль полей $|\mathbf{E}|^2$ и $|\mathbf{H}|^2$, см. рис. 1б, в. Видно, что фокусы являются сингулярностями Н-типа, а седла – поляризационными сингулярностями.

Для понимания этого результата отметим, что поляризационные сингулярности соответствуют локальному образованию стоячих волн, когда через сингулярность проходят пары волн равной амплитуды, распространяющиеся в противоположных направлениях. Это предполагает наличие у сингулярности выделенных направлений. Такие направления есть у седла – это “усы” сепаратрисы. В отличие от седла, фокус не имеет выделенных направлений, в силу чего образование стоячих волн в окрестности фокуса затруднено²⁾. Отметим, что такое различие между фокусами и седлами топологически устойчиво, так как эти сингулярности топологически не эквивалентны и не могут переходить друг в друга при преобразовании координатной системы [41].

Особо подчеркнем, что обсуждаемые области образования стоячих волн имеют существенно субволновые размеры, что хорошо видно на рис. 1, где для наглядности длина волны падающего излучения изображена в том же масштабе, что и структуры полей.

Важным свойством обсуждаемых результатов является то, что полевые сингулярности (фокусы) оказались связаны с обнулением поля перпендикулярного инвариантной плоскости. В данном случае это поле $\mathbf{H}$. Такая структура полевых сингулярностей является общим свойством особых точек, принадлежащим инвариантным плоскостям. При этом, если плоскость поляризации перпендикулярна инвариантной, то полевые сингулярности оказываются Е-типа. Чтобы убедиться в справедливости сказанного, рассмотрим рассеяние света цилиндром.

В. Цилиндр. Также, как и в предыдущем разделе, развитая феноменологическая теория справедлива для бесконечного цилиндра с произвольной формой поперечного сечения. Приведенные ниже примеры кругового цилиндра взяты только для упрощения вычислений.

Рассмотрение начнем с простейшего случая нормального падения и двух независимых поляризаций падающей волны – ТЕ и ТМ, см. рис. 2, где ориентация координатных осей и вектора $\mathbf{k}$ соответствует общепринятой, см., например, [31]. В этом случае зависимость полей от координаты z исчезает, задача становится двумерной (2D), разложения для

компонент вектора Пойнтинга в окрестности сингулярности приобретают вид $S_x(x, y) \approx s_x^{(x)}x + s_x^{(y)}y$; $S_y(x, y) \approx s_y^{(x)}x + s_y^{(y)}y$, а условие $\text{div } \mathbf{S} = 0$ сводится к равенству $s_x^{(x)} + s_y^{(y)} = 0$.

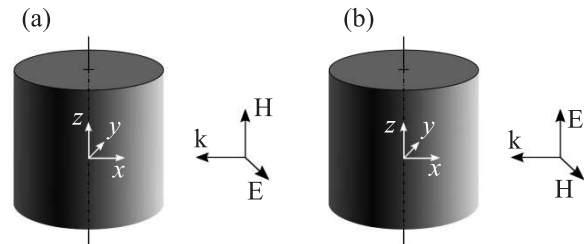


Рис. 2. Взаимная ориентация цилиндра, координатных осей и векторов $\mathbf{k}$, $\mathbf{E}$, $\mathbf{H}$ падающей волны. (а) – ТЕ поляризация; (б) – ТМ поляризация [28, 31]

В результате для корней характеристического уравнения вместо (6), (7) получаем следующее выражение:

$$\kappa_{1,2} = \pm \sqrt{\left(s_x^{(x)}\right)^2 + s_x^{(y)}s_y^{(x)}}. \quad (8)$$

Таким образом, в 2D случае закон сохранения энергии приводит к жесткому ограничению на возможные типы особых точек, а именно: при $\left(s_x^{(x)}\right)^2 + s_x^{(y)}s_y^{(x)} > 0$ это седла, а при $\left(s_x^{(x)}\right)^2 + s_x^{(y)}s_y^{(x)} < 0$ – центры. Существование других особых точек запрещено. Случай $\left(s_x^{(x)}\right)^2 + s_x^{(y)}s_y^{(x)} = 0$ – вырожденный. Для его анализа требуется учесть более высокие члены разложения $S_{x,y}(x, y)$.

В качестве примера, на рис. 3, 4 представлены структуры полей и линии тока вектора Пойнтинга при рассеянии ТЕ и ТМ поляризованного излучения цилиндром. Эти примеры полностью согласуются с приведенными выше общими соображениями.

III. Диссипативные эффекты. Из сказанного ранее следует, что поскольку окружающая рассеивающую частицу среда должна быть недиссипативной, то диссипативными свойствами может обладать только сама частица. Поэтому обсуждаемые в этом разделе сингулярности должны находиться внутри такой частицы.

Как диссипация влияет на свойства обсуждаемых сингулярностей? Качественное соображение состоит в том, что поскольку теперь движение вдоль линии тока сопровождается диссипативными потерями, то линии тока не могут образовывать семейства замкнутых силовых линий. Это делает невозможными су-

²⁾Важное дополнение к этому рассуждению сделано в Заключении.

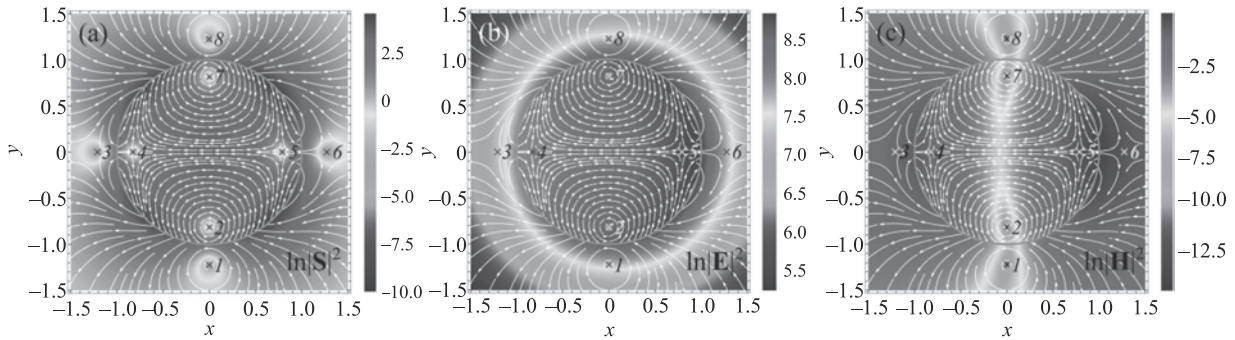


Рис. 3. (Цветной онлайн) Рассеяние плоской ТЕ-поляризованной электромагнитной волны круговым цилиндром. Линии тока вектора Пойнтинга, а также поля $|\mathbf{S}|^2$, $|\mathbf{E}|^2$, $|\mathbf{H}|^2$ – в логарифмическом масштабе; $q = 0.1$; $\varepsilon = -1$. Падающая волна распространяется в отрицательном направлении оси x , см. рис. 2. Структуры полей зеркально симметричны относительно плоскости $y = 0$, перпендикулярной плоскости рисунка. Крестики (x) обозначают сингулярности поля $\mathbf{S}$. Поверхность цилиндра обозначена зеленой окружностью. Центры (точки 1, 2, 7, 8) соответствуют сингулярностям Н-типа. Седла (точки 3–6) – поляризационным сингулярностям [28]

существования особых точек типа центр – они становятся фокусами³⁾.

При количественном описании рассматриваемой задачи единственное отличие диссипативной среды от недиссипативной сводится к записи закона сохранения энергии, который в диссипативной среде имеет вид $-\operatorname{div} \mathbf{S} = Q > 0$. Что касается Q , то в выбранных нами безразмерных переменных оно задается следующим выражением: $Q = \varepsilon'' q |\mathbf{E}|^2$ (напомним, что q здесь – это параметр размера, равный kR).

Отметим, что диссипация связана только с электрическим полем, поскольку магнитная проницаемость на оптических частотах равна единице. Это вносит асимметрию между полями $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$. В частности, следует ожидать, что влияние диссипации на сингулярности Н-типа будет существенно большее, чем на сингулярности Е-типа.

Действительно, в равенстве $-\operatorname{div} \mathbf{S}(\mathbf{r}) = Q(\mathbf{r})$ правая и левая части должны быть одного порядка малости. В рассматриваемом приближении $\operatorname{div} \mathbf{S} \approx \sum_n s_{x_n}^{(x_n)} = \text{const}$. Соответственно, в правой части равенства следует положить $Q(\mathbf{r}) \approx Q(\mathbf{r}_s) = \text{const}$, где $\mathbf{r}_s$ – координата особой точки. Всюду ниже под Q будет пониматься именно $Q(\mathbf{r}_s)$. В сингулярностях Н-типа и поляризационных сингулярностях электрическое поле не обращается в ноль. Соответственно,

$Q \neq 0$. Дальнейшее рассмотрение для сферы и цилиндра удобно проводить отдельно.

А. Сфера. Для сферы корни характеристического уравнения по-прежнему даются выражениями (6), (7), однако вместо условия $\sum_n s_{x_n}^{(x_n)} = 0$ теперь должно использоваться условие $\sum_n s_{x_n}^{(x_n)} = -Q$. Поскольку одно дополнительное условие накладывается на три независимых коэффициента $s_{x_n}^{(x_n)}$, в задаче остается достаточно степеней свободы, чтобы это не приводило к ее качественным изменениям. В частности, γ в выражениях (6), (7) может иметь как положительный, так и отрицательный знак, т.е. линии тока могут как приближаться к сингулярности, так и удаляться от нее. При этом убегание траекторий от сингулярности не противоречит наличию диссипативных потерь, так как последние компенсируются притоком энергии вдоль направлений трансверсальных инвариантной плоскости. Подчеркнем также, что обнуление γ при $s_x^{(x)} + s_z^{(z)} = 0$ еще не означает замкнутости линий тока, так как на них влияют члены более высокого порядка, не учтенные в линейном приближении; см. ниже обсуждение этого вопроса при рассеянии на цилиндре.

Заметим также, что интегральная форма закона сохранения энергии позволяет вывести простую формулу, связывающую различные компоненты вектора Пойнтинга в окрестности сингулярности. С этой целью построим окружающую сингулярность поверхность, имеющую форму кругового цилиндра с радиусом основания r и осью, проходящей через данную особую точку перпендикулярно инвариантной плоскости. Введем локальную цилиндрическую систему координат, центр которой совпадает с рассматриваемой сингулярностью, а ось – с осью построенного

³⁾ Это совершенно верно в 2D. В 3D, в принципе, возможна ситуация, когда поле $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ устроено таким образом, что диссипативные потери для траекторий в инвариантной плоскости в точности компенсируются притоком энергии вдоль трансверсальных к этой плоскости направлений. В такой исключительной ситуации существование замкнутых траекторий становится возможным.

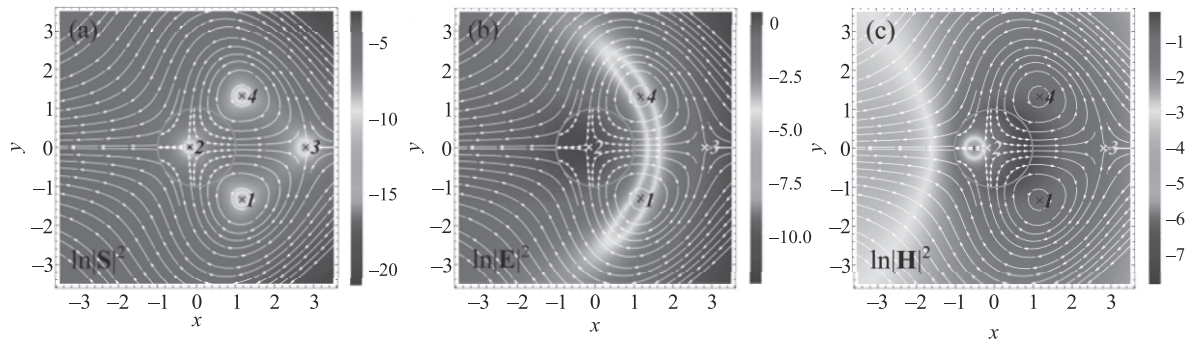


Рис. 4. (Цветной онлайн) То же, что на рис. 3, при ТМ поляризации падающего излучения и $q = 0.3$, $\varepsilon = 16$. В этом случае центры (точки 1, 4) соответствуют сингулярностям Е-типа [28]

цилиндра. Тогда, учитывая, что поток вектора Пойнтинга через поверхность цилиндра равен мощности, диссипированной в его объеме, легко получаем

$$\langle S_r \rangle \approx -\frac{rs_y^{(y)} + Q}{2}, \quad (9)$$

где $\langle S_r \rangle$ – усредненная по угловой переменной радиальная компонента вектора Пойнтинга в локальной системе координат. Выражение (9) справедливо для любого типа особой точки, лежащей в инвариантной плоскости.

В. Цилиндр. В отличие от сферы, в случае рассеяния бесконечным круговым цилиндром переход от 3D к 2D приводит к существенно более радикальному влиянию эффектов диссипации на структуру и тип возможных сингулярностей. Рассмотрение начнем со случая чистой ТЕ или ТМ поляризации падающего излучения.

Прежде всего отметим, что выражения для корней характеристического уравнения теперь приобретают вид, аналогичный выражениям $\kappa_{1,2}$ для сферы, см. (6). При этом, $\gamma = -Q/2$ [29]. Что же касается α , то эта величина может быть как чисто действительной, так и чисто мнимой. Таким образом, для $Q > 0$ и ТЕ-поляризованной падающей волны, когда все особые точки являются точками Н-типа, возможными сингулярностями являются только седла, а также устойчивые фокусы и узлы. Эти количественные результаты полностью согласуются с приведенными выше качественными аргументами.

При ТМ поляризации падающего излучения электрическое поле в сингулярной точке обнуляется и $Q = 0$. Может показаться, что в этом случае ситуация оказывается эквивалентна недиссипативному пределу, но это не так. Дело в том, что обнуление диссипации происходит в единственной точке, а именно – в самой сингулярности. В ее

окрестности величина электрического поля мала, но не равна нулю и описывается членами разложения более высокого порядка, не учтенными в развитой линейной теории. Учет этих членов превращает замкнутые на себя линии тока (особенность типа центр) в спиральные, сходящиеся к особой точке траектории, точно также как это происходит для ТЕ поляризации. Разница состоит в том, что теперь в силу экстремально малой диссипации при том же значении ε шаг этих спиралей оказывается значительно меньше, чем для ТЕ поляризации.

В качестве примера соответствующие поля и линии тока приведены на рис. 5, 6, где представлены результаты расчетов для цилиндра из германия на длинах волн $\lambda_1 = 1590$ нм и $\lambda_2 = 1494$ нм с учетом фактической величины его диэлектрической проницаемости при этих значениях λ [42]. Такой выбор продиктован тем, что $\varepsilon(\lambda_1) \approx 17.775 + i0.024$, в то время как $\varepsilon(\lambda_2) \approx 17.983 + i0.483$, т.е. при близких значениях $\text{Re} \varepsilon(\lambda_{1,2})$ значения $\text{Im} \varepsilon(\lambda_{1,2})$ отличаются более чем в двадцать раз. Это позволяет выяснить влияние диссипации на поведение полей в окрестностях особых точек при практически фиксированных прочих параметрах задачи.

Величина параметра размера q при обоих значениях λ была одинаковой и равнялась 1.62, что при данных значениях $\varepsilon(\lambda_{1,2})$ соответствует окрестности дипольного резонанса как для ТЕ, так и для ТМ поляризаций. Это обеспечивало качественное совпадение структуры поля $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ для обеих поляризаций. Отметим также, что $R/\lambda_{1,2} \approx 0.26$, т.е. для падающего излучения такой цилиндр является существенно суб-волновой частицей.

Хотя отмеченные на рис. 5а, d и рис. 6а, с сингулярности кажутся центрами, зум показывает, что на самом деле они – устойчивые фокусы. При этом шаг спиральных линий тока в случае ТЕ поляризации

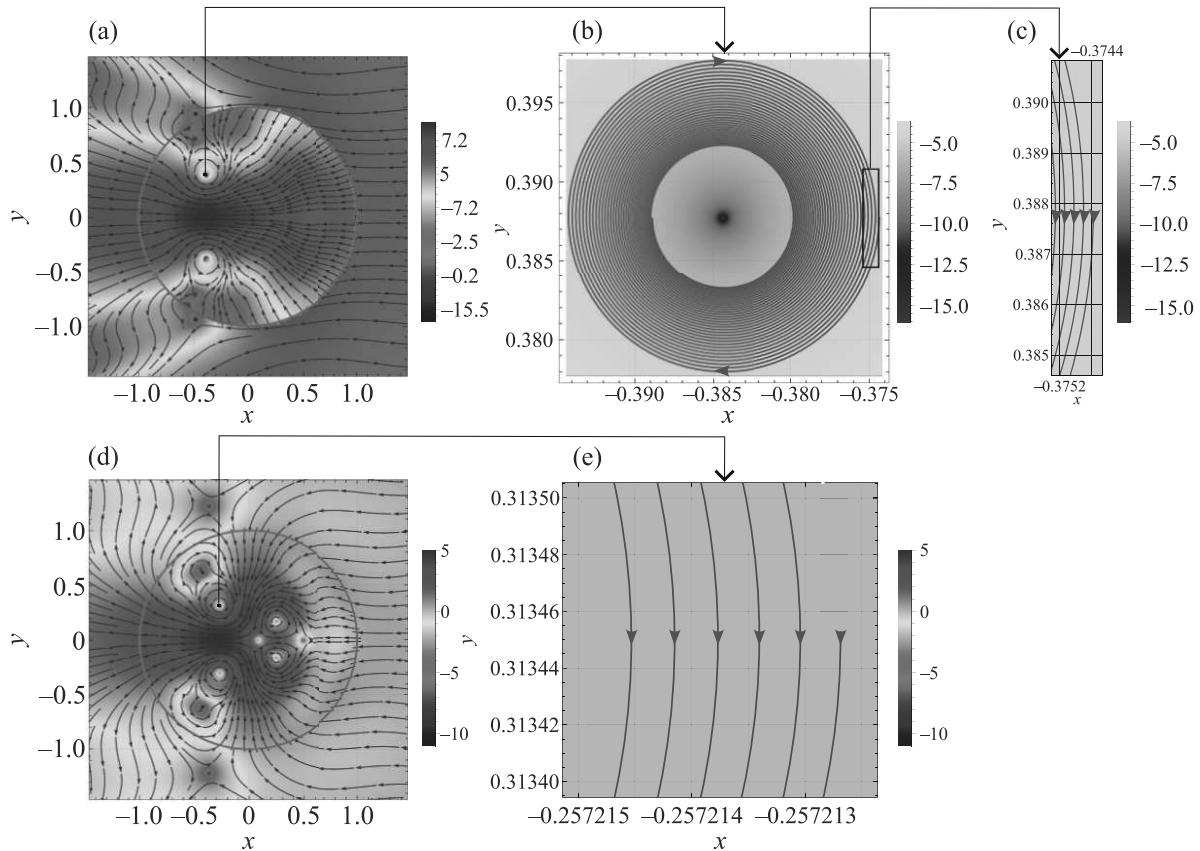


Рис. 5. (Цветной онлайн) Рассеивание света германиевым цилиндром в вакууме. Падающая плоская линейно поляризованная волна распространяется в отрицательном направлении оси x . Поле вектора Пойнтинга и его линии тока. Поверхность цилиндра изображена зеленой окружностью; $\lambda = \lambda_1 = 1590$ nm; $\varepsilon(\lambda_1) \approx 17.775 + i0.024$; $q = 1.62$. Структура поля симметрична относительно плоскости $y = 0$, перпендикулярной плоскости рисунка. Панели (a)–(c) – TE поляризация падающего излучения; (d), (e) – TM поляризация. Панель (b) – зум окрестности сингулярности, помеченной на (a) малым черным прямоугольником. То же относится к панелям (d) и (e). Панель (c) – зум области, отмеченной на (b) прямоугольником. См. детали в тексте. Обратите внимание на существенно разный масштаб панелей (c) и (e) [29]

оказывается существенно больше, чем в случае TM. В обоих случаях шаг растет с увеличением значения мнимой части диэлектрической проницаемости, ср. рис. 5 и 6.

IV. Эффекты нарушения симметрии. До сих пор мы рассматривали высокосимметричные решения. Однако в реальном эксперименте симметрия всегда нарушается. В этой связи важное значение приобретает вопрос о топологической устойчивости полученных результатов при нарушении симметрии, т.е. о том, насколько обсуждаемые выше результаты универсальны, и как будут меняться свойства сингулярностей при нарушении симметрии. При этом следует различать слабое нарушение симметрии за счет неидеальности формы лазерного пучка и/или рассеивающей частицы, флуктуаций диэлектрической проницаемости и т. п., и сильные нарушения – на-

пример, при рассеивании света частицей произвольной формы.

Что касается сильного нарушения симметрии, то, хотя автору неизвестно ни одного достоверного примера сингулярностей поля вектора Пойнтинга в таких задачах, нет никаких причин, по которым такие сингулярности не могли бы возникнуть. Если такая сингулярность возникает, то в силу отсутствия симметрии она должна быть существенно трехмерной. В общем случае, якобиан $J \equiv \left(\frac{\partial(S_x, S_y, S_z)}{\partial(x, y, z)} \right)_s$ имеет девять действительных ненулевых компонент, а соответствующее кубическое характеристическое уравнение – три корня $\kappa_{1,2,3}$, из которых либо все три действительные, либо один действительный, а два комплексно сопряженные. При этом одно условие $Sp\{J\} = -Q$, накладываемое на коэффициенты якобиана, не приводит к ограничениям на знаки кор-

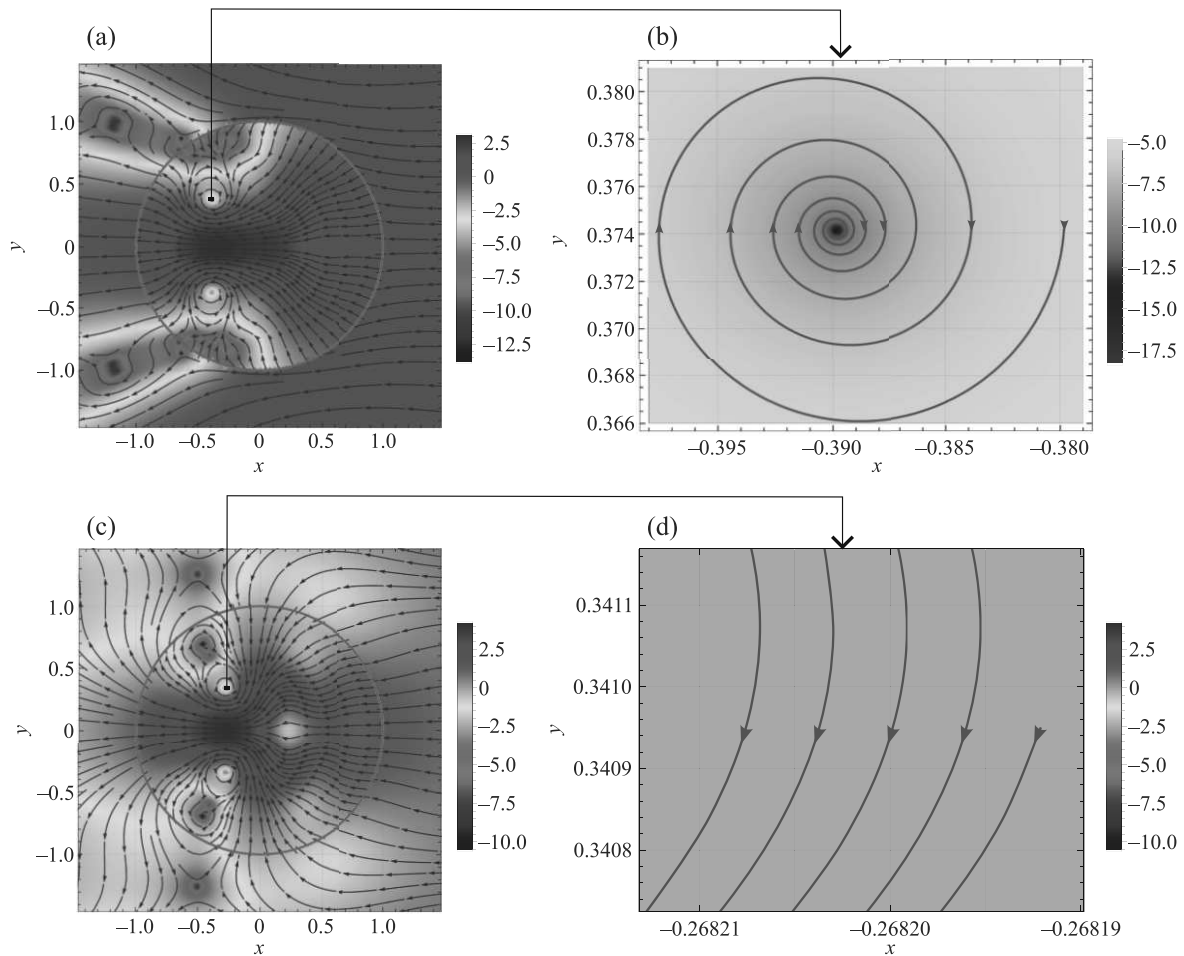


Рис. 6. (Цветной онлайн) Тот же, что и на рис. 5а, b, d, e, но для $\lambda = \lambda_2 = 1494$ нм; $\varepsilon(\lambda_2) \approx 17.983 + i0.483$ [29]

ней характеристического уравнения. Ситуация оказывается такой же, как и для обсуждавшегося выше случая сферы. Если три действительных корня имеют одинаковые знаки, то это узел (устойчивый при $\kappa_{1,2,3} < 0$ и неустойчивый при противоположном знаке). Если же один из корней имеет знак, противоположный двум другим, то это седло-узел. Наконец, если два корня комплексные, то сингулярность – седло-фокус. Это все, что в общем случае можно сказать про сингулярность при сильном нарушении симметрии.

Значительно более интересен случай слабого нарушения симметрии. Этот вопрос был изучен в работе [30], где исследовалось рассеяние цилиндром плоской электромагнитной волны, для которой вектор $\mathbf{k}$ по-прежнему оставался перпендикулярным оси цилиндра, но последняя составляла с плоскостью поляризации произвольный угол α , см. рис. 7. Такой случай интересен тем, что является простейшим вариантом задачи с несколькими группами симметрии, часть из которых контролируемо нарушается,

а часть остается в силе. Конкретно, в рассматриваемом примере меняя угол α , можно контролировать нарушение зеркальной симметрии относительно плоскости xy , в то время как симметрия по отношению к произвольным трансляциям вдоль оси цилиндра сохраняется.

В силу отмеченной трансляционной симметрии поля $\mathbf{E}$, $\mathbf{H}$ и $\mathbf{S}$ могут зависеть только от x и y и не могут от z . Поскольку в особой точке обнуляются все три компоненты вектора Пойнтинга, то ее координаты x, y должны определяться системой из *трех* независимых уравнений: $S_x(x, y) = S_y(x, y) = S_z(x, y) = 0$, которым должны удовлетворять *две* переменные. Такая система переопределена и в общем случае решений не имеет.

Отсюда, казалось бы, следует вывод об отсутствии в задаче особых точек. Это не совсем так. Дело в том, что возможны ситуации, когда одна или несколько компонент вектора Пойнтинга тождественно обнуляются вследствие сохранившейся симметрии, что сокращает число уравнений в системе,

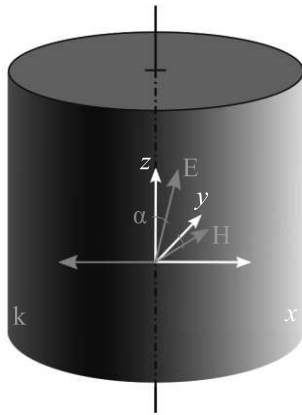


Рис. 7. (Цветной онлайн) Взаимная ориентация цилиндра, координатной системы и векторов $\mathbf{k}$, $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$ падающей электромагнитной волны при произвольной ориентации ее плоскости поляризации относительно оси цилиндра [30]

определяющей положение сингулярности, и делает уравнения совместными.

Детальный анализ симметрии данной задачи с учетом ограничений, накладываемых граничными условиями на поверхности цилиндра, показывает, что компоненты вектора Пойнтинга удовлетворяют следующим соотношениям: [30]

$$(S_x(x, y), S_y(x, y), S_z(x, y)) = (S_x(x, -y), -S_y(x, -y), -S_z(x, -y)). \quad (10)$$

Из этих соотношений, в частности, следует, что $S_z \equiv 0$ на оси x . Тогда на этой оси возможно появление особых точек. Отметим, что такие сингулярности могут быть только узлами и седлами, так как топологическая структура центров и фокусов не удовлетворяет зеркальной симметрии компонентов S_x и S_y относительно оси x .

Однако, теперь, наряду с истинными сингулярностями появляются сингулярности фиктивные – эти точки являются сингулярными в 2D проекции линий тока на плоскость xy , но имеют ненулевую z -компоненту вектора Пойнтинга, поэтому в 3D они представляют собой регулярные точки, множество которых создает вертикальную линию, параллельную оси z . Пример такой фиктивной сингулярности, а также две истинные особые точки, лежащие на оси x представлены на рис. 8.

Отметим, что аналогичные “фиктивные” сингулярности хорошо известны и часто встречаются, например, в теории параксиальных пучков – сингулярные точки существуют только в проекции линий тока на плоскость, перпендикулярную оси пучка, в то время как компонента вектора Пойнтинга вдоль оси

пучка остается конечной, т. е. в 3D такие “сингулярности” являются регулярными точками, см., например, публикации [43, 44].

Важное отличие таких “сингулярностей” от обсуждающихся в настоящем разделе состоит в том, что для первых направление, в котором компонента вектора Пойнтинга не обнуляется, навязывается симметрией пучка и соответствует его оси, иными словами, либо совпадает со средним направлением распространения падающего излучения, либо, в некоторых неординарных ситуациях, оказывается ему противоположно. В случаях же, обсуждаемых здесь, это ограничение снимается. В частности, ненулевая компонента вектора Пойнтинга в точке $\mathbf{r}_3$ на рис. 8а перпендикулярна волновому вектору падающей плоской волны, ориентированному антипараллельно оси x , что хорошо видно на рис. 8б.

Из рисунка 8б также следует, что изображенная на нем трехмерная линия тока никакой трансляционной симметрией вдоль оси z не обладает. Легко понять, почему это так. Действительно, в общем случае в регулярной точке все три компоненты вектора $\mathbf{S}$ отличны от нуля и не равны по величине. Тогда из уравнения (2) следует, что зависимость от “времени” t каждой из трех пространственных координат линии тока, выходящей из данной регулярной точки, индивидуальна. Это приводит к существенно трехмерной форме рассматриваемой линии. С другой стороны, поскольку проекция этой линии на плоскость xy соответствует сходящейся спирали, см. рис. 8а, такая линия не может быть инвариантна по отношению к трансляциям вдоль оси z . Из этих рассуждений очевидно, что трехмерность и отсутствие трансляционной симметрии являются общими свойствами линий тока в такой задаче, за исключением прямых линий параллельных оси x , лежащих в плоскости xz , которые в силу условий (10) также являются точными решениями уравнения (2).

Вывод об отсутствии трансляционной симметрии у трехмерных линий тока находится в кажущемся противоречии с отмеченной выше инвариантностью поля $\mathbf{S}$ относительно произвольных трансляций вдоль оси z . В действительности никакого противоречия нет. Замена $z \rightarrow z + \text{const}$ переводит линию тока, в другую линию тока, форма которой идентична исходной.

Данные результаты показывают, что поведение линий тока в окрестности обсуждаемых здесь особенностей является топологически устойчивым по отношению к слабому нарушению симметрии. Хотя такое нарушение приводит к регуляризации особых точек за счет возникновения малой трансверсальной к ис-

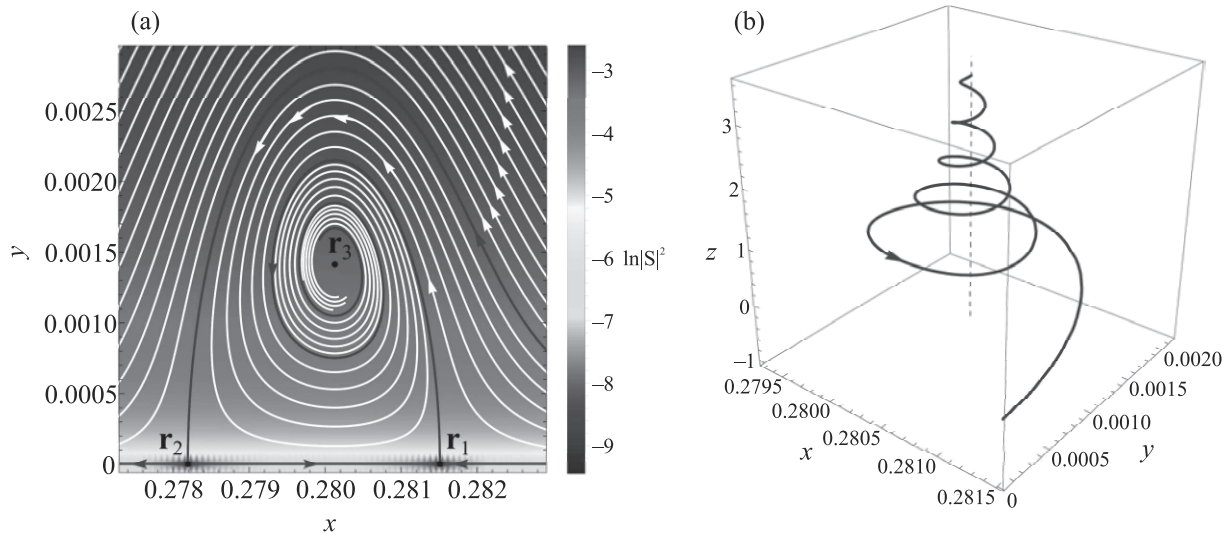


Рис. 8. (Цветной онлайн) Поле вектора Пойнтинга и его линии тока внутри германиевого цилиндра. Волновой вектор падающей плоской линейно поляризованной волны антипараллелен оси x , см. рис. 7. Ось цилиндра составляет с плоскостью поляризации угол $\alpha = 45.403^\circ$; $\varepsilon = 17.775 + 0.024i$; $q = 1.62$; (a) – 2D проекция линий тока на плоскость, перпендикулярную оси цилиндра. В проекции имеются три сингулярности, отмеченные черными точками: два седла ($r_{1,2}$), лежащие на оси x и устойчивый фокус вне этой оси (r_3). Последняя точка является фиктивной особенностью – в трехмерном пространстве она регулярна. Это хорошо видно на панели (b), где представлено 3D изображение части уса сепаратрисы, выходящей из седла r_1 в сторону r_3 – он является асимптотически уходящей в бесконечность спиралью, которая навивается на параллельную оси цилиндра прямую линию. Проекция этой линии на плоскость xy и дает точку r_3 [30]. См. детали в тексте. Обратите внимание на существенно разный масштаб осей x , y и z на панели (b)

ходной инвариантной плоскости компоненты вектора Пойнтинга, изменения структуры линий тока в проекции на исходную инвариантную плоскость не только не меняется качественно, ср. рис. 5d и 8a, но и количественные изменения остаются малы в меру малости нарушения симметрии. Более подробно этот вопрос обсуждается в работе [30].

Конструктивное использование симметрии задачи позволяет также построить феноменологическую теорию, объясняющую последовательность бифуркаций, приводящих к рождению (аннигиляции) как фиктивных, так и истинных сингулярностей как при изменении угла α , так и при изменении других параметров задачи (т. е., q или ε). Однако, по мнению автора, этот материал представляет узкоспециальный интерес и здесь обсуждаться не будет. Читатель, интересующийся этими вопросами, может найти их изложение в работе [30].

V. Заключение. В заключение заметим, что поскольку поляризационные сингулярности связаны с образованием стоячих волн в малой окрестности особой точки, это предполагает существование в данной области фиксированных направлений, вдоль которых пары волн распространяются в противоположных направлениях. Дальнейшие рассуждения оказываются существенно различными в 2D и 3D случаях.

В 2D для сингулярностей типа центр и фокус такие направления отсутствуют. Поэтому данные сингулярности принадлежат к полювому типу. Что касается узлов и седел, то здесь никаких ограничений нет, и для них оказываются возможными оба типа электромагнитных сингулярностей. Однако в рассматриваемую задачу поля $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$ входят симметричным образом. Обнуление же одного из них в особой точке выделяет это поле по отношению к другому. Тогда следует ожидать, что, если такое обнуление не следует из топологической структуры особенности (как это было в случае центра и фокуса), то в общем случае узлы и седла должны представлять собой поляризационные сингулярности. Полевые же особенности для таких сингулярностей являются случаями исключительными, связанными с определенным вырождением. Так или иначе, все седла и узлы, наблюдавшиеся нами до сих пор в различных случаях, относились к поляризационному типу.

Что касается 3D, то поскольку кубическое характеристическое уравнение всегда имеет, по крайней мере, один чисто действительный корень, в окрестности такой точки имеется выделенное направление, совпадающее с собственным вектором, соответствующим этому чисто действительному корню, по которому потоки энергии по обе стороны сингулярности на-

правлены противоположно друг другу. По этой причине топологическая структура сингулярности не накладывает никаких ограничений на ее электромагнитный тип. Тем не менее, в случае рассеяния сферой все лежащие в инвариантной плоскости фокусы оказывались полевого типа. Возможно, это связано с нарушением симметрии между $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$, вносимой совпадением инвариантной плоскости с плоскостью поляризации.

Отметим также задачу о вычислении топологического заряда данных сингулярностей, а также выяснение вопроса о его сохранении при различных бифуркациях, рассмотренных в работе [30]. Хотя принципиальных трудностей в поисках ответа на эти вопросы не видно, в настоящий момент они остаются открытыми, и их можно рассматривать как темы будущих исследований.

В заключение еще раз подчеркнем, что все обсуждаемые сингулярности не связаны с какими-либо особенностями падающего лазерного пучка. Они появляются спонтанно при рассеянии плоской линейно поляризованной волны, никаких особенностей не имеющей.

Таким образом, в работе выявлена глубокая связь между топологической структурой сингулярностей поля вектора Пойнтинга, их электромагнитным типом, законом сохранения энергии, симметрией задачи и размерностью пространства. Полученные результаты проливают новый свет на проблему циркуляции электромагнитной энергии в полях сложной конфигурации и создают базу для их практического применения в различных приложениях, в частности, в формировании потоков энергии заданной субволновой структуры, что важно для многих нанотехнологических приложений.

Автор благодарен Б. Я. Рубинштейну за обсуждение данной статьи и полезные замечания.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта # 21-12-00151 (аналитические исследования) и Министерства Науки и высшего образования Российской Федерации в рамках проекта # 075-15-2022-1150 (компьютерные вычисления и компьютерная графика). Изучение влияния эффектов симметрии на свойства особых точек вектора Пойнтинга проведено при поддержке гранта Российского научного фонда # 23-72-00037.

1. I. Mokhun, R. Khrobatin, A. Mokhun, and J. Viktorovskaya, *Optica Applicata* **37**, 261 (2007).

2. A. V. Novitsky and L. M. Barkovsky, *Phys. Rev. A* **79**, 033821 (2009).

3. M. R. Dennis, K. O'Holleran, and M. J. Padgett, *Singular Optics: Optical Vortices and Polarization Singularities*, ed. by E. Wolf, Elsevier (2009), ch. 5, v. 53, p. 293.

4. D. Gao, A. Novitsky, T. Zhang, F. C. Cheong, L. Gao, C. T. Lim, B. Luk'yanchuk, and C.-W. Qiu, *Laser Photonics Rev.* **9**, 75 (2014).

5. L. Yue, B. Yan, J. N. Monks, R. Dhama, C. Jiang, O. V. Minin, I. V. Minin, and Z. Wang, *Sci. Rep.* **9**, 20224 (2019).

6. O. V. Angelsky, A. Y. Bekshaev, S. G. Hanson, I. I. Mokhun, M. V. Vasnetsov, and W. Wang, *Front. Phys.* **9**, 651964 (2021).

7. D. Gao, W. Ding, M. Nieto-Vesperinas, X. Ding, M. Rahman, T. Zhang, C. Lim, and C.-W. Qiu, *Light Sc. Appl.* **6**, e17039 (2017).

8. I. Mokhun, A. Arkhelyuk, Y. Galushko, Y. Kharitonovtva, and J. Viktorovskaya, *Appl. Opt.* **51**, C158 (2012).

9. C. F. Bohren, *Am. J. Phys.* **51**, 323 (1983).

10. Z. Wang, B. Luk'yanchuk, M. Hong, Y. Lin, and T. Chong, *Phys. Rev. B* **70**, 035418 (2004).

11. M. Bashevoy, V. Fedotov, and N. Zheludev, *Opt. Express* **13**, 8372 (2005).

12. M. I. Tribelsky and B. S. Luk'yanchuk, *Phys. Rev. Lett.* **97** (2006).

13. B. Luk'yanchuk, Z. Wang, M. Tribelsky, V. Ternovsky, M. Hong, and T. Chong, *J. Phys. Conf. Ser.* **59**, 234 (2007).

14. B. Luk'yanchuk, M. Tribelsky, V. Ternovsky, Z. Wang, M. Hong, L. Shi, and T. Chong, *Journal of Optics A: Pure and Applied Optics* **9**, S294 (2007).

15. V. A. Canós, E. A. Gurvitz, F. A. Benimetskiy, D. A. Pidgayko, A. Samusev, A. B. Evlyukhin, V. Bobrovs, D. Redka, M. I. Tribelsky, M. Rahmani, K. Z. Kamali, A. A. Pavlov, A. E. Miroshnichenko, and A. S. Shalin, *Laser Photonics Rev.* **15**, 2100114 (2021).

16. М. И. Трибельский, А. Е. Мирошниченко, *Успехи физических наук* **192**, 45 (2022).

17. L. Yue, Z. Wang, B. Yan, Y. Xie, Y. E. Geints, O. V. Minin, and I. V. Minin, *Photonics* **9**, 154 (2022).

18. Y. E. Geints, I. V. Minin, and O. V. Minin, *Opt. Lett.* **47**, 1786 (2022).

19. Y. E. Geints, I. V. Minin, and O. V. Minin, *Opt. Commun.* **524**, 128779 (2022).

20. M. Berry, N. Zheludev, Y. Aharonov et al. (Collaboration), *J. Opt.* **21**, 053002 (2019).

21. A. K. Ospanova, A. Basharin, A. E. Miroshnichenko, and B. Luk'yanchuk, *Opt. Mater. Express* **11**, 23 (2021).

22. В. В. Котляр, А. Г. Налимов, С. С. Стафеев, *Компьютерная оптика* **42**, 392 (2018).

23. V. V. Kotlyar, S. S. Stafeev, and A. A. Kovalev, *Opt. Express* **27**, 16689 (2019).
24. M. V. Berry, *Journal of Optics A: Pure and Applied Optics* **6**, 259 (2004).
25. В. В. Котляр, А. А. Ковалев, *Топологический заряд оптических вихрей*, ООО “Новая техника”, Самара (2021).
26. M. V. Berry, *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences* **392**, 45 (1984).
27. E. Cohen, H. Larocque, F. Bouchard, F. Nejdassattari, Y. Gefen, and E. Karimi, *Nature Reviews Physics* **1**, 437 (2019).
28. M. I. Tribelsky and B. Y. Rubinstein, *Nanomaterials* **12**, 1878 (2022).
29. M. I. Tribelsky and B. Y. Rubinstein, *Nanomaterials* **12**, 3164 (2022).
30. M. I. Tribelsky, *arXiv.org* (2023), 2305.08534v2.
31. C. F. Bohren and D. R. Human, *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*, WILEY-VCH, Verlag, N.Y. (1998).
32. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Наука, М. (1982).
33. J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, Wiley, N.Y. (1998), p. 832.
34. K. Y. Bliokh, Y. S. Kivshar, and F. Nori, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 033601 (2014).
35. K. Y. Bliokh, A. Y. Bekshaev, and F. Nori, *Nat. Commun.* **5**, 3300 (2014); 10.1038/ncomms4300.
36. A. Y. Bekshaev, K. Y. Bliokh, and F. Nori, *Phys. Rev. X* **5**, 011039 (2015).
37. X. Xu and M. Nieto-Vesperinas, *Phys. Rev. Lett.* **123**, 233902 (2019).
38. S. N. Khonina, S. A. Degtyarev, A. V. Ustinov, and A. P. Porfirev, *Opt. Express* **29**, 18634 (2021).
39. Y. Tang and A. E. Cohen, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 163901 (2010).
40. A. Lininger, G. Palermo, A. Guglielmelli, G. Nicoletta, M. Goel, M. Hinczewski, and G. Strangi, *Adv. Mater.* 2107325 (2022); <https://doi.org/10.1002/adma.202107325>.
41. В. И. Арнольд, *Обыкновенные дифференциальные уравнения*, МЦНМО, М. (2012).
42. M. Polyanskiy, *Refractive index database*, <http://refractiveindex.info/>, accessed: May 25, 2022.
43. A. Y. Bekshaev and M. Soskin, *Opt. Commun.* **271**, 332 (2007).
44. A. Bekshaev, K. Y. Bliokh, and M. Soskin, *J. Opt.* **13**, 053001 (2011).

Два режима динамики когерентных столбовых вихрей во вращающейся жидкости

Д. Д. Тумачев^{+*1)}, С. В. Филатов⁺⁺, С. С. Вергелес^{+×}, А. А. Левченко^{++×}

⁺Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН, 142432 Черноголовка, Россия

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

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

Поступила в редакцию 17 июля 2023 г.

После переработки 2 августа 2023 г.

Принята к публикации 2 августа 2023 г.

Экспериментально исследована генерация вихревого течения в несжимаемой жидкости внутри вращающегося закрытого аквариума кубической формы. Возбуждение течения осуществлялось путем создания мелкомасштабных вихрей вблизи боковых ребер куба. В объеме жидкости наблюдались когерентные столбовые вихри-циклоны, простирающиеся от дна до крышки куба. Время существования циклонов значительно превышало время вязкого затухания за счет трения о дно и крышку. Установлено, что существуют два режима квази-двумерной турбулентности, которые характеризуются разными способами взаимодействия квази-двумерного течения и инерционных волн. Исследованы радиальные профили средней по времени азимутальной скорости в когерентных вихрях в этих двух режимах, показано, что отличаются размерами и распределением завихренности по радиусу.

DOI: 10.31857/S1234567823180076, EDN: wxwjog

Введение. Интерес к изучению турбулентных течений во вращающейся как целое жидкости объясняется широким спектром приложений, начиная с геофизики и астрофизики и заканчивая инженерным делом [1, 2]. Технический прогресс в измерении поля скорости течения методами измерения частиц по изображению частиц (*particle image velocimetry*, PIV) и измерения частиц по траекториям частиц (*particle tracking velocimetry*, PTV), достигнутый в последние два десятилетия, открыл путь для значительно более детального определения структуры и динамики течений, в частности, турбулентного потока вращающейся как целого жидкости, см., например, обзор [3].

Существует качественное различие двумерных и трехмерных турбулентных статистически изотропных течений. Тогда как в трехмерной турбулентности преобладает прямой каскад энергии [4, 5], в двумерной турбулентности преобладает обратный каскад энергии [6]. Иными словами, в двумерном течении наблюдается объединение вихрей в более крупные, тогда как в трехмерном течении преобладает дробление вихрей на более мелкие. Эксперименты по двумерной турбулентности в тонких слоях [7] показали, что в конечной системе со слабым трением о дно обратный каскад приводит к образованию когерент-

ных вихрей. Когерентные структуры согласно [8] – это долгоживущие упорядоченные крупномасштабные образования на фоне мелкомасштабной турбулентности, которые обладают высокой степенью универсальности для определенного турбулентного типа движения. Примерами когерентных структур могут служить подковообразные вихри в турбулентных пограничных слоях [9] и конденсаты [10].

Возникновение когерентных вихрей наблюдается и в турбулентных течениях вращающейся жидкости, где сила Кориолиса доминирует над силами инерции. В этом случае формируются столбовые вихревые структуры, однородные вдоль оси вращения, в которых скорость течения направлена в плоскости, ортогональной оси вращения. Таким образом, эффективная размерность течения снижается до двух, в частности, прямой каскад энергии сменяется обратным. Такое квази-двумерное течение наблюдалось экспериментально [11, 12] и в численном моделировании [13]. В общем случае полное течение быстро вращающейся жидкости представляет собой наложение квази-двумерного течения и инерционных волн [2]. В главном приближении эти течения являются независимыми [14], хотя и взаимодействующими, благодаря гидродинамической нелинейности [15]. Несмотря на то, что когерентные вихревые структуры являются предметом изучения уже многие годы, на на-

¹⁾e-mail: d.tumachev@issp.ac.ru

стоящий момент не ясны механизмы, определяющие их структуру. Основной проблемой является замыкание уравнения Рейнольдса на среднее течение в вихре, которое есть усредненное уравнение Навье–Стокса относительно быстрых турбулентных пульсаций. Замыкание предполагает вычисление тензора Рейнольдса при данном среднем вихревом течении. В модели, сформулированной в [16] и развитой в [17], это замыкание проведено в пределе сильного разделения масштабов между вихревой структурой и турбулентными пульсациями.

Целью этого письма является экспериментальное изучение особенностей квази-двумерной турбулентности в целом и устойчивых во времени столбовых вихрей в частности, определение радиальной структуры этих вихрей и определение характера их взаимодействия с инерционными волнами. Мы оставляем за рамками данного исследования вопрос, как формируются и зарождаются вихри, рассматривая случай статистически стационарного состояния.

Экспериментальная методика. Экспериментальная установка представляла собой кубический стеклянный аквариум с ребром 1 м, установленный на вращающуюся платформу рис. 1а. Куб полностью

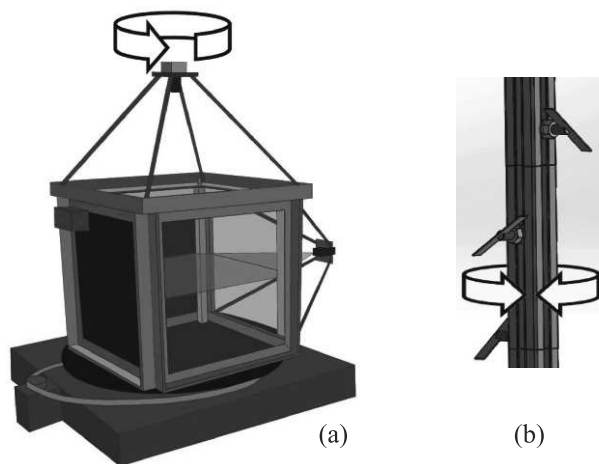


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Эскиз экспериментальной установки; (б) – часть мешалки, которой производилось возбуждение турбулентности

заполнен дистиллированной водой и сверху герметично закрыт прозрачной стеклянной крышкой. Визуализация вихревого движения в жидкости производится с помощью методики лазерного листа. Для этого в воду добавлялись частички полиамида РА-12 со средним размером 90 мкм. Частички подсвечивал лазерный лист, направленный горизонтально посередине куба. Ось расположенной сверху видео-

камеры была направлена перпендикулярно лазерному листу. Полученные изображение после обработки на компьютере с помощью PIV метода [18, 19] позволяли получать двумерное поле скорости в плоскости лазерного луча. Возбуждение турбулентного движения внутри куба проводилось вращением четырех вертикальных расположенных по углам куба мешалок с закрепленными на них лопатками рис. 1б. На каждой такой мешалке расположено по 10 лопаток. Мешалки, таким образом, имели неоднородную по вертикали геометрию, в результате чего их вращение эффективно возбуждало инерционные волны. Чтобы мешалки сами по себе не сообщали течению вращение относительно вертикальной оси, их вращение было периодическим: в первую секунду происходили 2 оборота в одну сторону, во вторую секунду – 2 оборота в противоположную сторону. Скорость вращения мешалок во всех экспериментах одинакова. Симметричность движения лопаток проверялась проведением эксперимента, в котором куб вращался в противоположную сторону, в результате чего были получены результаты, статистически идентичные исходному направлению вращения. Отметим, что наиболее близкий к нашему метод возбуждения течения использовался в работах [20, 21].

Все эксперименты начинались с раскручивания куба с одновременным включением мешалок. Эксперименты выполнялись при конечной скорости вращения от 0.12 до 0.72 об/с, которая достигалась при постоянном угловом ускорением 0.05 об/с². Для крупномасштабной квази-двумерной компоненты течения основной диссипативной силой во вращающейся системе является трение о дно и крышку куба в пограничном слое Экмана [1, 17]. Это трение характеризуется временем затухания $\tau = H/(2\sqrt{\nu\Omega})$, в наших экспериментах составлявшее $600 \div 200$ с. После раскрутки куба и включения мешалок выжидалось как минимум 5τ для того, чтобы система пришла в состояние статистического равновесия.

Турбулентное макро-число Рейнольдса [22] $Re_M = v_{rms} L_f / \nu$, вычисляемое по среднеквадратичной скорости $v_{rms} = \langle v_x^2 + v_y^2 \rangle^{1/2}$ и размеру лопаток $L_f \simeq 6.5$ см, составляло около 2000 (рис. 2). Турбулентное макро-число Россби $Ro_M = v_{rms} / (2\Omega L_f)$ составляло от 0.35 до 0.05. Отношение этих параметров Re_M / Ro_M , что есть характерное значение отношения сил Кориолиса и объемных вязких сил, находится вблизи значения $5 \cdot 10^3$, что является стандартной величиной для такого типа эксперимента, см. обзор [12]. Значения безразмерных параметров говорят о том, что в течении доминирует сила Кориолиса, а самое течение умеренно турбулентное.

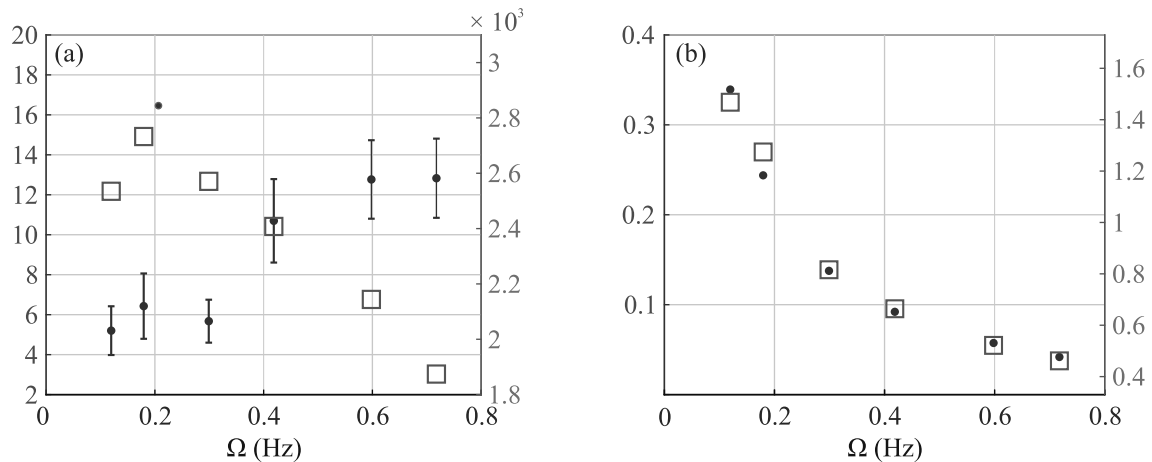


Рис. 2. (Цветной онлайн) (a) – Зависимости макро-числа Рейнольдса (пустые квадраты $\square$) и числа вихрей (заполненные кружки $\bullet$) от частоты вращения куба. (b) – Зависимости микро-числа Россби Ro_ω (пустые квадраты $\square$) и макро-числа Россби Ro_M (заполненные кружки $\bullet$) от частоты вращения куба

Время съемки в срединной горизонтальной плоскости составляло 15 мин с частотой 75 кадров в секунду. Из полученных данных с помощью метода PIV получали 2D2C поле скорости [18, 19]. Пространственное разрешение поля скорости составляло 0.4 см.

Экспериментальные результаты. Характерные поля завихренности $\omega = \partial_x v_y - \partial_y v_x$ в горизонтальной плоскости на полувысоте, представлены на рис. 3 для минимальной частоты вращения куба 0.12 об/с (рис. 3a) и для максимальной частоты вращения куба 0.72 об/с (рис. 3b). Желтый цвет соответствует циклоническому вращению (вращению в ту же сторону, что и вращение системы), а синий – антициклоническому. На рисунке 3 можно наблюдать много вихрей, преимущественно циклонической направленности. Вихри однородны по вертикали, что проверялось в отдельном эксперименте, в котором поле скорости измерялось в вертикальном срезе. Эти вихри перемещаются в горизонтальной плоскости с характерной скоростью несколько см/с. Антициклоны были слабо выражены и имели малое время жизни, поэтому в дальнейшем речь пойдет только про циклоны. Анализ эволюции вихревых пятен показывает, что существуют вихри со временем жизни больше, чем время эксперимента (900 с). Соответственно, эти вихри существуют дольше вязкого времени Экмана. Более того, за время эксперимента не наблюдалось существенного изменения энергии таких долгоживущих вихрей.

На рисунке 3a число вихрей N примерно в 2–3 раза меньше, чем на рис. 3b. Переход от низкого числа вихрей на минимальной скорости вращения к большому числу вихрей на высокой скорости вращения

куба происходит скачкообразным образом при скорости вращения около $\Omega^* \approx 0.35$ об/с, см. рис. 2a, а не линейным образом, как наблюдалось в [23]. Число вихрей, одновременно присутствующих в объеме, слабо изменялось в течении одного эксперимента. Несмотря на то, что число вихрей резко менялось со скоростью вращения куба, скачок не испытывают некоторые другие статистические величины. К ним относятся микро-число Россби Ro_ω , определяющееся как средняя завихренность в центрах циклонов деленная на 2Ω , и макро-число Россби Ro_M (рис. 2b). Отметим, что имеет место почти линейная зависимость $Ro_\omega = 3.5 \cdot Ro_M + 0.3$. Этот график показывает, что при низкой скорости вращения вихри являются относительно более сильными. График макро-числа Рейнольдса Re_M (рис. 2a) также не демонстрирует каких-либо особенностей вблизи частоты Ω^* .

Скачкообразная зависимость числа вихрей N , тем не менее, имеет соответствие со скачкообразной зависимостью более полной статистической информации о течении. Функция распределения (PDF) локального числа Россби $Ro(\mathbf{r}) = \omega(\mathbf{r})/2\Omega$ при разных скоростях вращения куба (рис. 4), где $\mathbf{r} = \{x, y\}$, построенного для области, не включающей пограничные слои, также демонстрирует скачкообразное изменение. При низких скоростях вращения это число внутри антициклонов удовлетворяет неравенству $Ro(\mathbf{r}) > -1$. При высоких скоростях вращения нижняя граница $Ro(\mathbf{r}) > -0.5$. Аналогичным образом сужается верхняя граница распределения. Следует, однако, отметить, что скачок в форме хвостов PDF происходит при более низкой скорости вращения, нежели скачок числа вихрей N . В целом же распределения качественно схожи с результатами, полу-

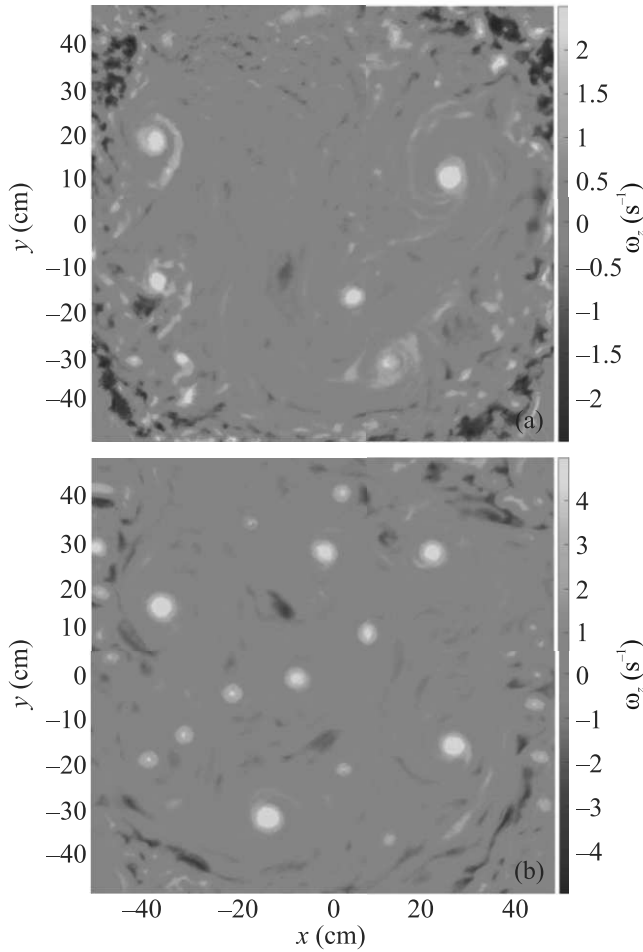


Рис. 3. (Цветной онлайн) Поле завихренности, усредненное по $1/3$ с в момент $t = 166$ с после начала съемки. (a) – Низкая скорость вращения 0.12 об/с; (b) – высокая скорость вращения 0.72 об/с

ченными предыдущими исследователями в [22, 24], несмотря на то, что там использовались иные методы возбуждения турбулентности. В частности, распределения не симметричны относительно нуля и соответствуют перемежаемой статистике. В нашем эксперименте коэффициент асимметрии составлял 1.33 и 2.4 при самой низкой и самой высокой скоростях соответственно. Отметим здесь, что именно потому, что число Россби достигает значений порядка единицы, мы не используем термин “геострофический” как характеристику квази-двумерного течения в целом и столбовых вихрей, в частности [2, 15], хотя при выполнении неравенства $Ro(\mathbf{r}) > -1$ это разделение становится условным.

На основании сделанных наблюдений мы можем выдвинуть предположение о существовании двух существенно разных турбулентных режимов квази-

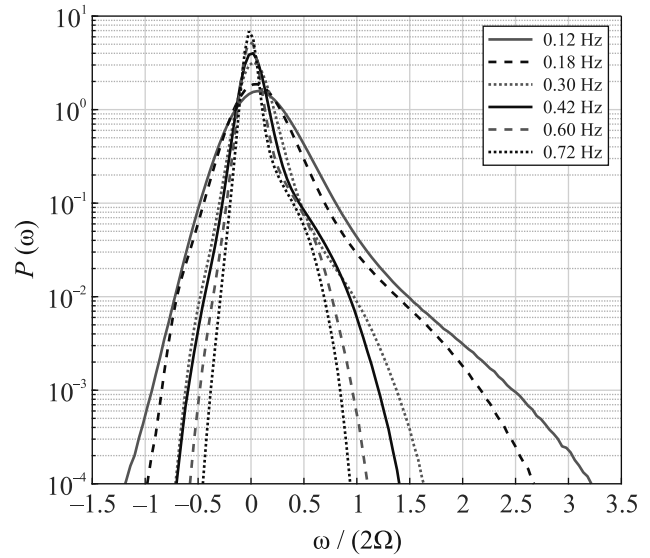


Рис. 4. (Цветной онлайн) PDF локального числа Россби $Ro(\mathbf{r}) = \omega/2\Omega$

двумерного течения. Рассмотрим более подробно свойства столбовых вихрей в этих двух режимах.

Низкая скорость вращения куба. Для измерения статистических свойств отдельного вихря необходимо перейти в систему отсчета, начало которой лежит на оси этого вихря. Центр вихря вслед за [10] определялся в главном приближении как положение экстремума завихренности, после чего производилась процедура уточнения положения следующим образом. Внутри квадратной области размером 5 см с центром в экстремуме завихренности находилась точка, характеризующаяся максимумом циркуляции, вычислявшейся по окружности с центром в этой точке и радиусом 2.5 см.

Для каждой скорости вращения был построен радиальный профиль азимутальной скорости в вихре $U_G^\varphi(r) = \langle U_i^\varphi(r, \varphi, t) \rangle_{\varphi, t, i}$, где усреднение производилось по углу φ , времени t и номеру i отслеженного вихря (красная кривая на рис. 5). На расстоянии от 2 до 20 см наблюдался почти плоский участок $U_G^\varphi(r)$. Похожий плоский участок радиального профиля $U_G^\varphi(r)$ уже наблюдался экспериментально [25] в тонком слое проводящей жидкости с электромагнитной накачкой. Также строилась зависимость производной по радиусу циркуляции скорости $\Gamma'(r) = r \cdot \langle \omega_i(r, \varphi, t) \rangle_{\varphi, t, i}$ (синяя штрих-пунктирная кривая на рис. 5), а r теперь – расстояние до оси вихря. Стоит отметить, что профиль величины $\Gamma'(r)$ не меняет знак. Радиус r_{core} сердцевин вихря, определявшейся согласно равенству $r_{\text{core}} \cdot \omega_G|_{r=0} = 2U_G^\varphi(r_{\text{core}})$, составлял около 2.3 см.

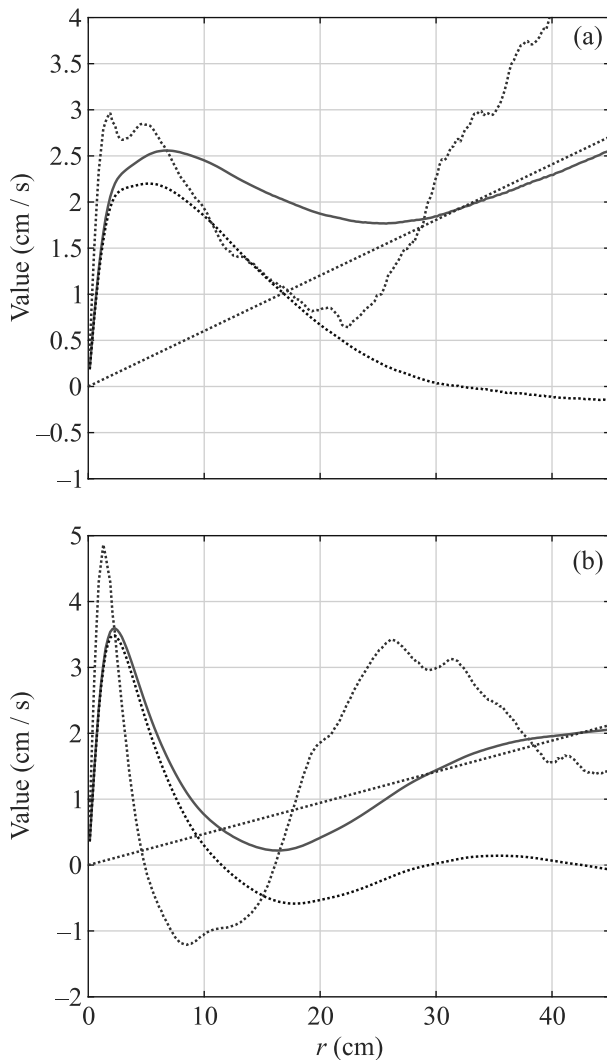


Рис. 5. (Цветной онлайн) Профили азимутальной скорости вихря $U_\phi(r)$ (сплошная линия), величины $\Gamma'(r)$ (штрих-пунктирная линия), величина аппроксимации профиля скорости среднего течения $U^\varphi(r) = \bar{\omega} \cdot r/2$ (прямая синяя пунктирная линия), профиль азимутальной скорости с вычтенным профилем скорости среднего течения $U_\phi(r) - U^\varphi(r)$ (черная пунктирная линия). (a) – Низкая скорость вращения 0.12 об/с, $\bar{\omega} = 0.06 \text{ c}^{-1}$; (b) – высокая скорость вращения 0.72 об/с, $\bar{\omega} = 0.047 \text{ c}^{-1}$

Относительно большое количество вихрей позволяет говорить о глобальном среднем течении на масштабе всей области течения. Для того, чтобы отделить течение, связанное с рассматриваемым вихрем, от глобального среднего течения, мы произвели вычитание из измеренного профиля скорости $U_\phi(r)$ скорости глобального среднего течения $U^\varphi(r)$. Поскольку, согласно нашим наблюдениям, вихри в среднем заполняли равномерно доступную область те-

чения, мы аппроксимировали $U^\varphi(r)$ линейным профилем скорости, $U^\varphi(r) = \bar{\omega} \cdot r/2$. Для определения средней завихренности вне пограничного слоя $\bar{\omega}$ нами проводилась линейная аппроксимация для скоростей $U_\phi(r)$, лежащих на расстоянии больших, чем 30 см (зеленая пунктирная прямая на рис. 5). Вычитание коллективного вращения вихрей из вычисленного ранее профиля азимутальной скорости $U_\phi(r)$ позволяет эмпирическим путем определить радиус вихрей как точку, где $U_\phi(r) - U^\varphi(r)$ обращается в нуль (см. рис. 5). Рассчитанный таким образом радиус вихрей равен $\simeq 25$ см. Отметим, что скорость среднего течения $\langle U \rangle$, вычисленная путем усреднения поля скорости по всему времени эксперимента, с хорошей точностью совпадает с той же оценкой $\bar{\omega} \cdot r/2$, где, в данном случае, r есть расстояние до центра куба.

Высокая скорость вращения куба. Радиальные профили азимутальной скорости $U_\phi(r)$ и величины $\Gamma'(r)$ представлены на рис. 5b. Вихри являлись в значительной степени изолированными (в терминах работы [26]). В изолированных вихрях завихренность в области сердцевин вихря компенсируется завихренностью, имеющей противоположный знак, в теле вихря, так что интеграл под кривой $\Gamma'(r)$, что есть полная циркуляция $\Gamma(r)$, связанная с вихрем, равен нулю. В нашем случае $\Gamma(r)$ достигала минимум на $\simeq 15$ см, что можно считать радиусом этих вихрей. Радиус сердцевин вихря r_{core} составлял те же 2.3 см. По-прежнему линейная аппроксимация среднего течения $\langle U \rangle$ хорошо описывается коэффициентом $\bar{\omega}$.

Таким образом, при высокой скорости вращения вихри оказываются не только относительно более слабыми, но и более мелкими, что, разумеется, находится в согласии с их большим количеством на единицу площади. Интегральной мерой одновременно силы и величины вихрей может служить величина флуктуаций энергии течения на фоне среднего $\langle U \rangle$. На рисунке 6 построена зависимость средней плотности энергии полного течения $v_{rms}^2/2$ и средней плотности энергии среднего течения $\langle U \rangle^2/2$ от скорости вращения. Вычитая из первого второе, мы получаем искомую меру — кинетическую энергию, заключенную в отдельных вихрях. Согласно рис. 6, она не зависит от частоты вращения куба. Заметим, что эта величина относительно устойчива к методу подсчета. Например, если считать энергию вихрей путем интегрирования компенсированного профиля $U_\phi(r) - U^\varphi(r)$, см. рис. 5, то отношение энергии изолированных вихрей к вихрям на низкой скорости вращения куба составит 0.5–0.6. Эта величина, умноженная на число вихрей, пропорциональна средней

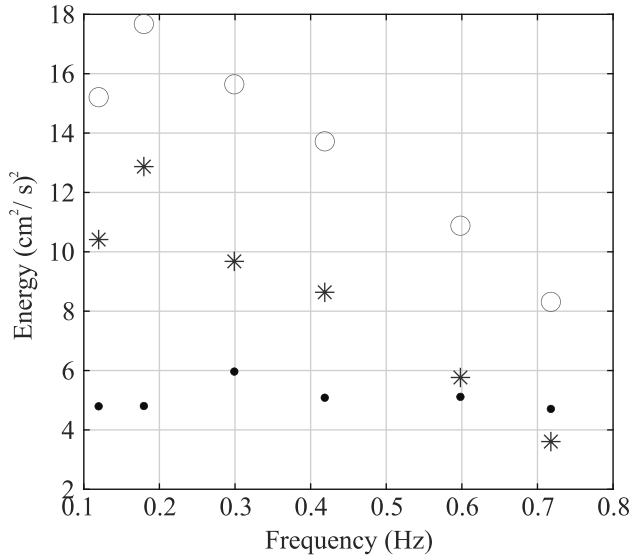


Рис. 6. (Цветной онлайн) Зависимости средней энергии (открытые кружки ○), энергии среднего течения (звездочки *), и разницы полной энергии и среднего течения (закрашенные кружки ●) от частоты вращения куба

энергии, содержащейся в отдельных вихрях на единицу площади, что также почти не зависит от скорости вращения. В итоге, если теперь нормировать энергию вихрей на Ω^2 , то мы опять придем к заключению, что вихри на высоких скоростях вращения являются относительно более слабыми.

Обсуждение. При турбулентном движении воды во вращающемся кубе наблюдаются долгоживущие когерентные вихри. Их время жизни значительно больше времени Экмана. Можно предложить два механизма поддержания энергии вихрей. Первый – за счет слияния столбовых вихрей, когда только что отделившийся от мешалки вихрь поглощается вихрем, который уже присутствует в кубе [27]. Вторым механизмом поддержания энергии вихрей является поглощение столбовыми вихрями инерционных волн, для чего требуется выполнение условий $\text{Re}_M \gg 1$ и $\text{Ro}(\mathbf{r}) \succeq -1$ [22, 28, 29].

Второй механизм, однако, оказывается подавленным, если макрочисло Россби Ro_M оказывается ниже некоторого порогового предела. Покажем это, считая число Россби малым, $\text{Ro}(\mathbf{r}) \ll 1$. Пренебрегая нелинейным взаимодействием инерционных волн между собой и предполагая, что длина волны инерционных волн мала по сравнению с характерным масштабом квази-двумерного течения, мы можем по теории возмущений описать нелинейное влияние неоднородности квази-двумерного течения $U_\alpha(t, \mathbf{r})$ на эволюцию волны, описываемую полем скорости $\mathbf{u}(t, \mathbf{r}, z)$. Рассмотрим волновой пакет, дви-

гающийся по траектории $\mathbf{R}(t)$. Уравнение Навье–Стокса, линеаризованное относительно $\mathbf{u}$, и записанное в волновом представлении в окрестности точки $\mathbf{R}$, имеет вид

$$\left(\partial_t + i(\mathbf{U}(t, \mathbf{R}) \cdot \mathbf{k}) - \sigma_{\beta\alpha} k_\beta \frac{\partial}{\partial k_\alpha} \right) \mathbf{u} + 2[\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{u}] = -((\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{U})_{\mathbf{k}} - i k p - \nu k^2 \mathbf{u}, \quad (1)$$

где $\mathbf{k}$ – волновой вектор, градиент скорости квазидвумерного течения $\sigma_{\beta\alpha}(t) = \partial_\alpha U_\beta(t, \mathbf{R})$ берется в точке нахождения $\mathbf{R}(t)$ волнового пакета, а индексы $\alpha, \beta = \{x, y\}$. В силу относительной малости длины волны мы ограничились приближением квазидвумерного поля скорости линейным профилем.

Проанализируем уравнение (1). Второе слагаемое в круглой скобке в левой части (1) обеспечивает перенос волнового пакета со скоростью потока $\mathbf{U}(t, \mathbf{R}(t))$. Пусть у рассматриваемого волнового пакета волновой вектор есть $\mathbf{K}$. Сила Кориолиса в (1) приводит к движению волнового пакета относительно потока с групповой скоростью, горизонтальные компоненты которой суть $V_\alpha^g = (2\Omega K_z / K^3) K_\alpha$. Скорость движения волнового пакета в горизонтальной плоскости, таким образом, есть

$$\frac{d\mathbf{R}_\alpha}{dt} = V_\alpha^g(t) + U_\alpha(t, \mathbf{R}). \quad (2)$$

Третье слагаемое в круглой скобке в левой части уравнения (1) выражает влияние неоднородности на поле волны. Его действие на любое поле, в том числе поле инерционной волны, приводит к изменению волнового вектора $\mathbf{K}$ вдоль характеристики [16, 17],

$$dK_\alpha/dt = -\sigma_{\beta\alpha} K_\beta, \quad K_z = \text{const}. \quad (3)$$

Отметим, что это же слагаемое вместе со слагаемыми в правой части обеспечивают изменение амплитуды волны со временем.

Теперь рассмотрим аксиально-симметричный столбовой вихрь с полем скорости $U_\alpha = U_G^\varphi(r) e_\alpha^\varphi$, где вектор r отсчитывается от оси вихря, а единичный вектор e_α^φ направлен по азимуту. Градиент такого поля есть

$$\sigma_{\beta\alpha} = \Sigma r_\alpha e_\beta^\varphi / r + (U_G^\varphi / r) \epsilon_{\beta\alpha}, \quad (4)$$

где локальная сила сдвига $\Sigma = r \partial_r (U_G^\varphi / r)$, а $\epsilon_{\alpha\beta}$ – единичный антисимметричный тензор второго ранга, $\epsilon_{xy} = 1$. Второе слагаемое в (2) производит перенос волнового пакета вместе с элементом жидкости, движущимся по круговой орбите в вихре, а второе слагаемое в (4) производит согласно (3) вращение

волнового вектора вместе с этим элементом жидкости. Оба этих вклада могут быть исключены переходом в связанную с этим элементом систему координат. В этой системе координат система уравнений (3), (2) приобретает вид

$$\frac{dK_r}{dt} = -\Sigma K_\varphi, \quad \frac{dR}{dt} = V_r^g = \frac{2\Omega K_z K_r}{k^3}, \quad (5)$$

а компоненты K_z и K_φ не изменяются. Исключив из системы уравнений (5) время, получим

$$\frac{K_z}{K_\varphi} d\left(\frac{1}{K}\right) = \frac{1}{2\Omega} \Sigma dR. \quad (6)$$

Как и должно быть для бездиссипативной системы, процесс изменения параметров волны обратим. Необратимость достигается только в случае, если интеграл от правой части (6) оказывается по абсолютной величине настолько велик, что абсолютная величина K волнового вектора в некоторый момент обращается в бесконечность. Это означает, что с учетом вязкости произойдет исчезновение волны и передача ее энергии квази-двумерному течению. Поскольку интеграл от правой части (4) оценивается как $v_{rms}/2\Omega$, а значение волнового числа вдали от вихря как $K \sim 1/L_f$, то условием достижения необратимости является превышение макро-числом Россби некоторого порогового значения, $Ro_M > Ro_M^*$. Отметим, что представленное рассуждение требует, чтобы локальное число Россби было мало, $\Sigma/2\Omega \ll 1$, в противном случае следует учитывать поправки к частоте вращения Ω со стороны течения [26]. Однако и при нарушении этого условия сделанные выводы остаются качественно верны.

Пороговое макро-число Россби $Ro_M^* \approx 0.1$ согласно графику на рис. 2b. При частотах вращения ниже Ω^* мы можем рассчитывать на применимость теории, развитой в [10, 16, 17]. Действительно, на рис. 5а есть область с плоским участком радиальной зависимости средней скорости в вихре $U_G^c(r)$ в соответствии с теоретическими оценками [17]. Развитая здесь теория предсказывает, что в этой области в процессе поглощения волн образуются гармоники с большим волновым числом, что находится в согласии с экспериментальными данными: энергетический спектр ведет себя как $k^{-2.4}$ на низких частотах вращения, тогда как на высоких скоростях вращения индекс увеличивается до $\simeq -3.3$. Наши попытки, однако, вслед за [30] установить выполнение уравнения Рейнольдса показали, что полное время нашего наблюдения не дает достаточного объема данных для полноценного статистического усреднения тензора Рейнольдса в уравнении на среднее течение в вихре.

Закключение. Экспериментально показано, что существуют два турбулентных режима квази-двумерного течения в сосуде с горизонтальными границами. Режимы отличаются разным количеством вихрей-циклонов и их профилями. В обоих режимах циклоны являются устойчивыми во времени структурами, которые существуют дольше времени вязкого затухания. Переход между режимами происходит при пороговом значении макрочисла Россби $Ro_M^* \approx 0.1$, показывающем отношение амплитуды скорости течения и групповой скорости инерционных волн. Нами приведены теоретические аргументы в пользу того, что переход сопровождается изменением режима взаимодействия инерционных волн с квази-двумерным течением. При относительно низких скоростях вращения сосуда, которые соответствуют относительно большому числу $Ro_M > Ro_M^*$, квази-двумерное течение эффективно поглощает инерционные волны. При относительно высоких скоростях вращения это число падает, так что снижается эффективность передачи энергии от инерционных волн столбовым вихрям.

Работа выполнена в Лаборатории “Современная гидродинамика”, созданной в рамках гранта Министерства науки и высшего образования РФ 075-15-2019-1893 в ИТФ им. Л. Д. Ландау РАН, при поддержке гранта Российского научного фонда # 22-22-00977.

1. H. P. Greenspan, *The theory of rotating fluids*, At the University Press, Cambridge (1968).
2. P. A. Davidson, *Turbulence in Rotating, Stratified and Electrically Conducting Fluids*, Cambridge University Press, Cambridge (2013).
3. S. J. Beresh, *Meas. Sci. Technol.* **32**, 102003 (2021).
4. U. Frisch, *Turbulence: the legacy of A.N. Kolmogorov*, Cambridge University Press, Cambridge (1995).
5. S. B. Pope, *Turbulent flows*, Cambridge University Press, Cambridge (2000).
6. G. Boffetta and R. E. Ecke, *Ann. Rev. Fluid. Mech.* **44**, 427 (2012).
7. J. Sommeria, *J. Fluid Mech.* **170**, 139 (1986).
8. *Нелинейные волны. Самоорганизация*, под ред. А. В. Гапонов-Грехов, М. И. Рабинович, Наука, М. (1983).
9. S. K. Robinson, *Ann. Rev. Fluid. Mech.* **23**, 601 (1991).
10. J. Laurie, G. Boffetta, G. Falkovich, I. Kolokolov, and V. Lebedev, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 254503 (2014).
11. A. McEwan, *Nature* **260**, 126 (1976).
12. F. S. Godeferd and F. Moisy, *Appl. Mech. Rev.* **67**, 030802 (2015).

13. A. Alexakis and L. Biferale, *Phys. Rep.* **767**, 1 (2018).
14. A. Campagne, B. Gallet, F. Moisy, and P.-P. Cortet, *Phys. Rev. E* **91**, 043016 (2015).
15. F. Pizzi, G. Mamatsashvili, A.. J. Barker, A. Giesecke and F. Stefani, *Phys. Fluids* **34**, 125135 (2022).
16. I. Kolokolov, L. Ogorodnikov, and S. Vergeles, *Phys. Rev. Fluids* **5**, 034604 (2020).
17. V. M. Parfenyev and S. S. Vergeles, *Phys. Fluids* **33**, 115128 (2021).
18. W. Thielicke and R. Sonntag, *Journal of Open Research Software* **9**, 12 (2021).
19. E. Stamhuis and W. Thielicke, *Journal of Open Research Software* **2**, 30 (2014).
20. E. Monsalve, M. Brunet, B. Gallet, and P.-P. Cortet, *Phys. Rev. Lett.* **125**, 254502 (2020).
21. N. Lanchon, D. O. Mora, E. Monsalve, and P.-P. Cortet, *Phys. Rev. Fluids* **8**, 054802 (2023).
22. C. Morize, F. Moisy, and M. Rabaud, *Phys. Fluids* **17**, 095105 (2005).
23. E. Hopfinger, F. Browand, and Y. Gagne, *J. Fluid Mech.* **125**, 505 (1982).
24. J.E. Ruppert-Felsot, O. Praud, E. Sharon, and H.L. Swinney, *Phys. Rev. E* **72**, 016311 (2005).
25. A. V. Orlov, M. Y. Brazhnikov, and A. A. Levchenko, *JETP Lett.* **107**, 157 (2018).
26. L. Z. Sansón and G. van Heijst, *J. Fluid Mech.* **412**, 75 (2000).
27. I. Kolokolov and V. Lebedev, *Phys. Rev. E* **93**, 033104 (2016).
28. L. Jacquin, O. Leuchter, C. Cambonxs, and J. Mathieu, *J. Fluid Mech.* **220**, 1 (1990).
29. V.M. Parfenyev, I.A. Vointsev, A.O. Skoba, and S.S. Vergeles, *Phys. Fluids* **33**, 065117 (2021).
30. A. Frishman and C. Herbert, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 204505 (2018).

Корреляционная кулоновская щель при магнитотуннелировании между слоями графена¹⁾

Ю. Н. Ханин⁺, Е. Е. Вдовин⁺, С. В. Морозов⁺, К. С. Новоселов^{*2)}

⁺Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов РАН, 142432 Черноголовка, Россия

^{*}Institute for Functional Intelligent Materials, National University of Singapore, Building S9, 4 Science Drive 2, 117544 Singapore

Поступила в редакцию 21 июня 2023 г.

После переработки 2 августа 2023 г.

Принята к публикации 3 августа 2023 г.

Обнаружено сильное подавление равновесного магнитотуннелирования в гетероструктуре графен/*hBN*/графен, обусловленное корреляционной кулоновской щелью в туннельной плотности состояний. Сравнение подавления равновесной туннельной проводимости G_0 в сильном магнитном поле при понижении температуры и зависимости ширины наблюдаемой щели Δ от величины фактора заполнения уровней Ландау ν с результатами аналогичных экспериментов в GaAs гетероструктурах показало их качественное подобие и подтвердило нашу гипотезу о природе эффекта. При этом, однако, полученная нами величина Δ значительно превосходит измеренные во всех предыдущих работах в полупроводниковых гетероструктурах, что связано, вероятно, с большим масштабом циклотронных энергий в графене по сравнению с GaAs в интервале нижних уровней Ландау.

DOI: 10.31857/S1234567823180088, EDN: wsdvxi

Изучение многочастичных корреляционных эффектов в полупроводниковых туннельных гетероструктурах с двумя параллельными слоями двумерного электронного газа (ДЭГ) уже давно привлекает внимание исследователей. Так, в полупроводниковых GaAs/AlAs гетероструктурах с параллельными слоями ДЭГ уже около 30 лет назад экспериментально были обнаружены проявления сильнокоррелированной электронной жидкости в слоях ДЭГ в магнитном поле, которые приводили к формированию кулоновской щели в туннельной плотности состояний и подавлению туннелирования между слоями [1–3]. Такая кулоновская щель при переходах электронов между двумя сильнокоррелированными слоями ДЭГ обусловлена необходимостью дополнительных затрат энергии на извлечение электрона из одного слоя и встраивание в другой. Суммарные затраты энергии этих процессов определяются кулоновским взаимодействием электронов внутри ДЭГ и составляют величину образующейся энергетической щели Δ .

Многочастичные теории такой щели [4–6], появившиеся в тот же период, предсказывают, что при фиксированном факторе заполнения $\nu < 1$ ее величина составляет $\Delta \approx 0.4e^2/4\pi\epsilon l_B$, где $l_B =$

$= (\hbar/eB)^{1/2}$ – магнитная длина, или если электронная жидкость образует решетку, подобную кристаллу Вигнера [7, 8], $\Delta \approx e^2/4\pi\epsilon a$, где $a = 1/(n\pi)^{1/2}$ – расстояние между электронами внутри слоя. Были также представлены теории щели в слабых магнитных полях (при больших $\nu \gg 1$) [9–12], которые, однако, так и не смогли дать удовлетворительного описания магнитополевых зависимостей $\Delta(B)$ из экспериментов [2, 3]. При этом в эксперименте [2] получена эмпирическая зависимость $\Delta \approx A\hbar\omega_c$ (где $\hbar\omega_c = \hbar eB/m^*$ – циклотронная энергия, A – константа), которая вполне согласуется и с предсказаниями различных теорий [9–12]. В представленной здесь работе это соотношение использовалось для сравнения щелей в графене и GaAs.

Открытие графена и появление вандерваальсовых гетероструктур придало новый импульс к исследованиям корреляционных эффектов. В графеновых гетероструктурах наблюдение туннельной щели из-за внутрислойной кулоновской корреляции было впервые упомянуто в работе [13], но это осталось без доказательств, вероятно, вследствие того, что фокус этой работы был направлен на исследование гигантского усиления туннельной проводимости из-за межслойной корреляции. Затем в работе [14] была обнаружена и изучена корреляционная кулоновская щель при магнитотуннелировании между графеновыми слоями через локализованное состояние в *hBN* барьере, где эксперимент осложнялся возмож-

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

²⁾e-mail: vdov62@yandex.ru

ным влиянием заряда на этом локализованном состоянии как на процесс туннелирования, так и на формирование и корректность измерения величины щели. Дополнительной трудностью интерпретации эксперимента в [14] являлось наблюдение щели только при туннельных переходах между уровнями Ландау (УЛ) с различными индексами вследствие особенностей дизайна структуры.

В данной же работе сообщается об обнаружении и изучении корреляционной кулоновской щели при прямом (без участия промежуточных состояний) туннелировании между слоями графена в графен/*hBN*/графен гетероструктуре с двумя затворами, что избавило нас, таким образом, от проблем эксперимента [14] и позволило корректно изучить формирование щели и напрямую измерить ее величину Δ . Для реализации возможности туннельных переходов между слоями графена при относительно малых энергиях без участия промежуточных состояний в нашем эксперименте использовались гетероструктуры с высокой степенью углового согласования $\sim 2^\circ$ графеновых слоев. Сравнение особенностей температурного поведения обнаруженного нами эффекта, таких как инверсия температурной зависимости равновесной проводимости с уменьшением фактора заполнения уровней Ландау (УЛ) ν и ее активационный характер при малых ν , с результатами аналогичных экспериментов в GaAs показывает их качественное подобие и подтверждает нашу интерпретацию природы эффекта. Обнаруженный рост величины щели с уменьшением ν также согласуется с ранними результатами для полупроводниковых систем. Однако характерные параметры и зависимости щели количественно сильно отличаются от измеренных в полупроводниковых системах. Так, величина Δ значительно превосходит величины, измеренные во всех этих работах, что связано, вероятно, с большим масштабом циклотронных энергий в графене по сравнению с GaAs в актуальном интервале УЛ, а также с возможным влиянием межслоевого кулоновского взаимодействия электронов [12, 15].

Исследованный образец изучался нами ранее в работах [16, 17] и представлял собой вертикальную вандерваальсовскую гетероструктуру, получаемую путем механического расслоения и переноса слоев графена и *hBN*. Схематическое изображение основных слоев структуры и измерительной цепи показаны на рис. 1, микрофотография и подробное описание образца даны на рис. S1 дополнительных материалов. Слои графена были кристаллографически взаимно сориентированы, угловое рассогласование кристаллографических решеток слоев верхнего

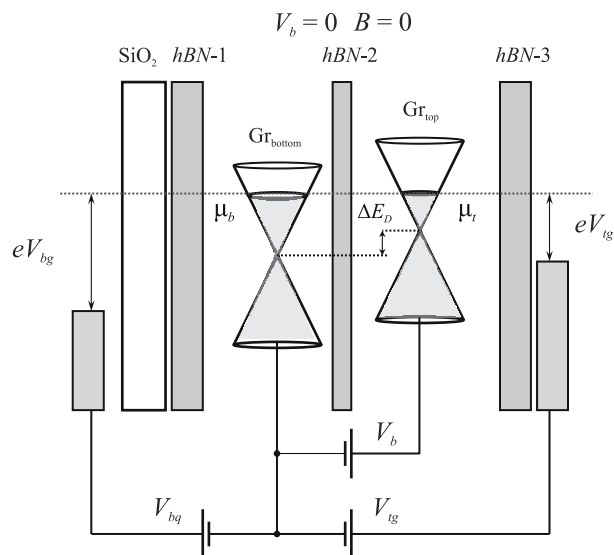


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема равновесного туннелирования между монослоями графена, где конусами Gr_{top} и Gr_{bottom} обозначены верхний и нижний монослои графена, *hBN*-1, *hBN*-2 и *hBN*-3 – нижний подзатворный, туннельный и верхний слой нитрида бора соответственно, SiO_2 – основной диэлектрический слой нижнего затвора, μ_t и μ_b – химические потенциалы в верхнем и нижнем слоях. Энергетический сдвиг дираковских точек, зависящий от V_{tg} , V_{bg} и V_b , обозначен как ΔE_D

и нижнего листов графена составляло $\sim 2^\circ$, а площадь их пересечения $\sim 25 \text{ мкм}^2$. Приложение магнитного поля B , перпендикулярного плоскости графеновых слоев, приводит к квантованию движения электронов в плоскости слоев и формированию неэквидистантных УЛ, графически представляющих собой окружности на поверхности дираковских конусов (см. рис. 2), энергетический спектр которых описывается выражением $E_N = \pm v_F (2e\hbar|N| \cdot B)^{1/2}$, где $N = 0, \pm 1, \pm 2$, а v_F – скорость Ферми. Приложение напряжений к верхнему и нижнему затворам (V_{tg} и V_{bg}) приводит к изменениям химических потенциалов μ_t и μ_b и последовательному заполнению/опустошению УЛ в слоях. Смещающее напряжение V_b изменяет взаимное расположение дираковских конусов по энергии, и в случае совпадения заполненного и пустого УЛ открывается возможный канал для резонансно-туннельного тока. Строго говоря, условию резонанса между УЛ с сохранением энергии и импульса соответствует пересечение заполненного и пустого УЛ в k -пространстве, что нельзя отразить на представленной упрощенной схеме туннелирования. Детально туннелирование между УЛ в двух слоях графена, разделенных туннельным барьером, описано в работе [18]. Изменение напряже-

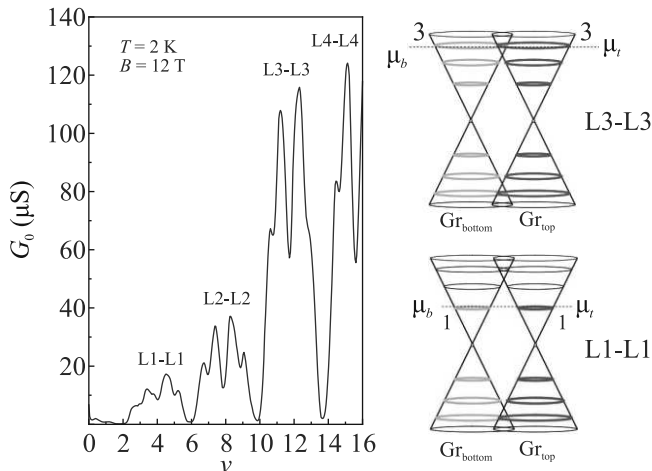


Рис. 2. (Цветной онлайн) Сечение карты равновесной проводимости при $B = 12$ Тл по линии равенства концентраций, $n_{\text{top}} = n_{\text{bottom}}$. На вставках справа показаны схемы туннельных переходов между уровнями Ландау верхнего и нижнего монослоев графена L3-L3 (вверху) и L1-L1 (внизу)

ния V_b и контроль за V_{tg} и V_{bg} давали в результате возможность наблюдать последовательность особенностей на ВАХ, соответствующих туннельным резонансам между отдельными УЛ в верхнем и нижнем слоях. Поддерживая же значение $V_b = 0$ и изменяя V_{tg} и V_{bg} , были построены трехмерные карты равновесной (т.е. вблизи $V_b = 0$) туннельной проводимости данных гетероструктур (см. карту для $B = 12$ Тл на рис. S2 дополнительных материалов). Идеальным инструментом для изучения проявлений коллективных эффектов в туннельных гетеросистемах являются эксперименты по измерению равновесной межслоевой туннельной проводимости в магнитном поле при условии поддержания равенства концентраций электронов в слоях, между которыми происходит туннелирование, с помощью верхнего и нижнего затворов. Соблюдение этих условий является критически важным для наблюдения и корректного измерения параметров корреляционной кулоновской щели в туннельной плотности состояний, как было показано ранее в экспериментальных работах с GaAs гетероструктурами [1, 2], где ранее была обнаружена кулоновская щель, поскольку в случае дисбаланса концентраций электрическое поле в барьере будет значительно усложнять интерпретацию величин измеряемых параметров щели. Именно такие измерения межслоевой туннельной проводимости при поддержании равенства концентраций электронов в графеновых слоях с помощью управления затворными напряжениями и составляют основу данной работы. Карты проводимости были построены с помощью мо-

дуляционной методики с амплитудой модулирующего напряжения 0.1–1 мВ на частоте 27 Гц. Измерения проводились при температурах 1.8–50 К. В отличие от предыдущих исследований [16, 17] здесь нами измерялись также и зависимости величины туннельного тока от напряжения смещения $I - V_b$ (или $dI/dV_b - V_b$) в условиях совпадения концентраций электронов верхнего и нижнего графенов вблизи нулевого смещения, т.е. при $n_{\text{top}} = n_{\text{bottom}}$ и $V_b = 0$.

На рисунке 2 показана зависимость равновесной туннельной проводимости от величины фактора заполнения $\nu = n_s h / e B$, где n_s – плотность двумерного газа, полученного из сечения экспериментальной карты в координатах V_{tg} и V_{bg} при $B = 12$ Тл. Это сечение карты по линии равенства концентраций, $n_{\text{top}} = n_{\text{bottom}}$, обозначено пунктирной линией на рис. S2 дополнительных материалов, приблизительно отвечающей соотношению $V_{tg} = 0.4 + 0.083 V_{bg}$. Каждая особенность, соответствующая переходу между УЛ с одинаковыми индексами, расщеплена на 4 пика. Величина расщепления для всех измеренных особенностей для $B = 12$ Тл лежит в интервале 7–9 мэВ. Такое расщепление обусловлено снятием спинового и долинного вырождения УЛ в сильном магнитном поле [17, 19–21]. Рост амплитуды резонансных особенностей с увеличением ν в слоях обусловлен как естественным ростом прозрачности туннельного барьера, так и запретом на туннельные переходы между нижними УЛ с сохранением продольной составляющей импульса, поскольку вследствие даже небольшой угловой разориентации графеновых слоев дираковские конусы разнесены в k -пространстве и начинают пересекаться только при определенной энергии. По нашим оценкам, для угловой разориентации графеновых слоев приблизительно в 2° эта энергия составляет примерно 150–200 мэВ и соответствует переходам между УЛ с индексами 3-3 в $B = 12$ Тл. На рисунке 2 показаны схемы возможных переходов между УЛ с номерами L1-L1 и L3-L3 в нашем образце в $B = 12$ Тл, из которых видно, что если для УЛ L3-L3 соответствующие орбитали, представленные в виде окружностей на поверхности конусов на рис. 2, пересекаются в k -пространстве и тогда возможны переходы между ними с сохранением как энергии, так и продольной составляющей импульса, то туннелирование между меньшими по номеру уровнями Ландау в 12 Тл возможно только с участием фононов [22] или же благодаря рассеянию на интерфейсе графен/ h BN.

На рисунке 3 представлены две $I - V_b$ характеристики нашего образца при $B = 12$ Тл, $T = 2$ К и таких значениях V_{tg} и V_{bg} , чтобы выполнялось

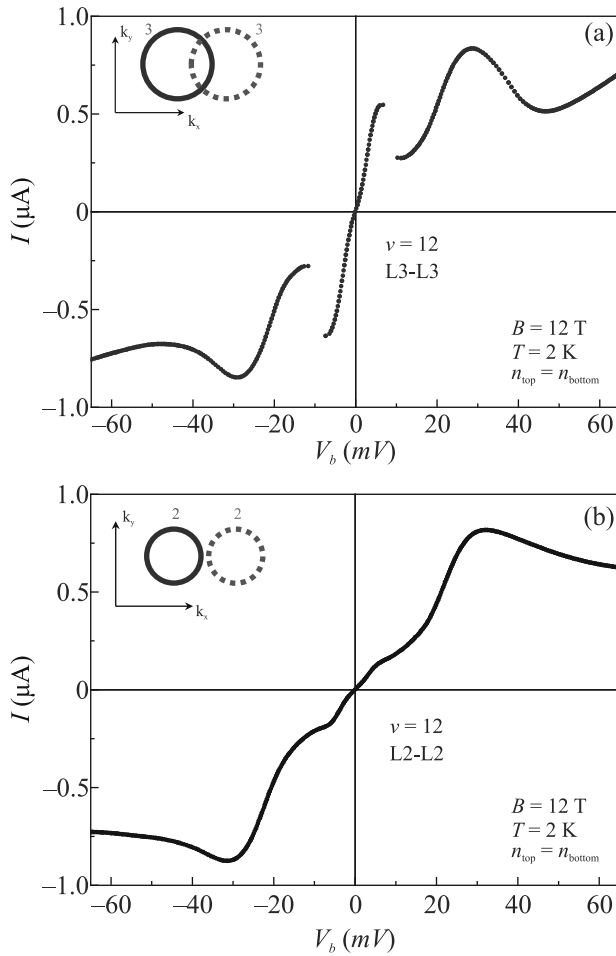


Рис. 3. (Цветной онлайн) $I - V_b$ характеристики образца при $B = 12 \text{ Тл}$, $T = 2 \text{ К}$ в условиях равенства концентраций $n_{\text{top}} = n_{\text{bottom}}$ при $V_b = 0$. (a) – $\nu = 12$ и $n_{\text{top}} = n_{\text{bottom}} \sim 3.46 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$; (b) – $\nu = 8$ и $n_{\text{top}} = n_{\text{bottom}} \sim 2.3 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ при $V_b = 0$. На вставках схематически показаны орбитали уровней Ландау в k -пространстве, соответствующие туннельным переходам между УЛ L3-L3 (a) и L2-L2 (b) при $V_b = 0$ в магнитном поле $B = 12 \text{ Тл}$ для образца с разориентацией кристаллических решеток верхнего и нижнего листов графена, равной приблизительно 2°

условие равенства концентраций $n_{\text{top}} = n_{\text{bottom}}$ при $V_b = 0$. Кривая на рис. 3a соответствует $\nu = 12$ и $n_{\text{top}} = n_{\text{bottom}} \sim 3.46 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$, а кривая на рис. 3b – $\nu = 8$ и $n_{\text{top}} = n_{\text{bottom}} \sim 2.3 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ при $V_b = 0$. Зависимость $I - V_b$ на рис. 3a демонстрирует традиционную для резонансного туннелирования форму с максимумами тока при $V_b \approx \pm 7 \text{ мВ}$ и следующими за ними областями отрицательной дифференциальной проводимости. Большое отношение пикового тока к долинному $I_{\text{peak}}/I_{\text{valley}} \sim 2$, по аналогии с традиционным резонансным туннелированием, свидетельствует о высокой степени сохранения импуль-

са при переходах между УЛ [16] и таким образом подтверждает нашу оценку, что при угловой разориентации листов графена $\sim 2^\circ$ орбитали, соответствующие туннельному переходу между УЛ L3-L3 в магнитном поле $B = 12 \text{ Тл}$, будут пересекаться в k -пространстве (см. вставку к рис. 3a). При дальнейшем увеличении напряжения смещения увеличивается “окно проводимости” и становится возможным одновременное туннелирование как через УЛ с большими индексами, так и туннелирование с участием фононов [18, 22], что и вызывает рост тока и широкий пик вблизи $V_b \sim 30 \text{ мВ}$. Однако зависимость $I - V_b$ на рис. 3b, соответствующая туннелированию между УЛ L2-L2 при малых напряжениях смещения не имеет области отрицательной дифференциальной проводимости, что указывает на преимущественно неупругие процессы переходов электронов между этими уровнями и, таким образом, также подтверждает нашу оценку. На основании этого, для исключения влияния неупругих процессов и упрощения интерпретации наблюдаемых эффектов здесь мы сосредоточимся на переходах L3-L3.

С понижением температуры при туннелировании между УЛ L3-L3 в больших магнитных полях на зависимостях $dI/dV_b - V_b$ проявляется провал вблизи $V_b = 0$. На рисунке 4a показаны такие зависимости для $\nu = 12$, $n_{\text{top}} = n_{\text{bottom}} \sim 3.46 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ при $T = 15 \text{ К}$ (красная кривая) и 2 К (синяя кривая), в магнитном поле $B = 12 \text{ Тл}$. Ширина провала при температуре 2 К и $B = 12 \text{ Тл}$, измеряемая как расстояние между максимумами проводимости, составляла $\Delta \approx 6 \text{ мВ}$, и он полностью замывается с ростом температуры до $\sim 15 \text{ К}$. При этом, на зависимостях $dI/dV_b - V_b$ при тех же значениях концентраций в малых магнитных полях провал отсутствовал (см., например, рис. 4b). Кроме того, температурное поведение зависимостей на рис. 4a и b принципиально различно: при наличии провала рост температуры приводит к увеличению туннельной проводимости вблизи $V_b = 0$, а в его отсутствие – к падению проводимости и традиционному температурному размытию резонанса из-за уширения УЛ. Таким образом, уже можно заключить, что, аналогично [1–3], в исследуемой графеновой гетеросистеме подавление равновесной туннельной проводимости так же имеет магнитополевую природу. Более того, как будет показано далее, наблюдаемый эффект подавления магнитотуннелирования обусловлен проявлением кулоновской щели в туннельной плотности состояний вследствие образования коррелированных коллективных состояний в ДЭГ графеновых слоев. А поскольку на данный момент нет теории такой кулоновской щели

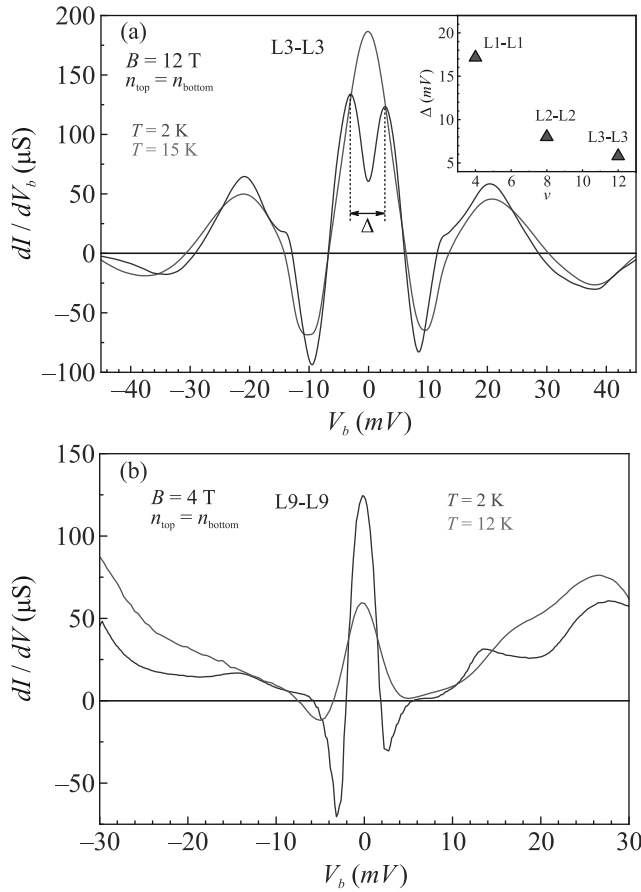


Рис. 4. (Цветной онлайн) (а) – $dI/dV_b - V_b$ зависимости для $\nu = 12$, $n_{\text{top}} = n_{\text{bottom}} \sim 3.46 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ при $T = 15 \text{ К}$ (красная кривая) и 2 К (синяя кривая), в магнитном поле $B = 12 \text{ Тл}$; на вставке показаны величины щели Δ для переходов L1-L1, L2-L2, L3-L3; (б) – $dI/dV_{\text{bias}} - V_{\text{bias}}$ зависимости для $\nu = 36$, $n_{\text{top}} = n_{\text{bottom}} \sim 3.46 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ при $T = 15 \text{ К}$ (красная кривая) и 2 К (синяя кривая), в магнитном поле $B = 4 \text{ Тл}$

для графеновых гетероструктур, мы будем строить доказательство природы наблюдаемого нами эффекта на основе сравнения полученных данных с результатами экспериментов по наблюдению щели в GaAs гетероструктурах [1–3], которые наиболее близки по экспериментальной реализации и методам и, поэтому, дают возможность наиболее прямого сравнения данных. Измеренное нами значение ширины щели $\Delta \approx 6 \text{ мВ}$ для $\nu = 12$, $n_{\text{top}} = n_{\text{bottom}} \approx 3.46 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ в $B = 12 \text{ Тл}$ значительно превышает результаты, полученные при сопоставимых значениях ν в [2], и сравнивается только с ширинами щели, измеренными в [1–3] в ультраквантовом пределе для $\nu < 1/2$. Поскольку все ранние работы в GaAs системах показали, что величина щели описывается зависимостью вида $\Delta \approx A\hbar\omega_c$, где $\hbar\omega_c$ – циклотронная энер-

гия и A – константа [1, 2, 9–12], и, предполагая одинаковый механизм образования щели в GaAs и графене, можно полагать, что отличие измеренной нами Δ от GaAs обусловлено значительной разницей циклотронных масс m_c [23] и, следовательно, величин $\hbar\omega_c = \hbar eB/m_c$ в GaAs и графене, в интервале нескольких нижних УЛ. Так же не стоит исключать возможное влияние на величину Δ и межслоевого кулоновского взаимодействия электронов [12, 15].

Интерпретация щели в предыдущих работах [1–3] с GaAs структурами основана на том, что величина Δ составляется из вкладов затрат энергии на “вырывание” электрона из одного слоя коррелированного ДЭГ и встраивания его в другой слой, и величина Δ при этом растет с уменьшением ν . Отсюда, естественно, следует, что Δ для туннельных переходов между УЛ с разными (соседними) индексами, например Δ_{12} , будет иметь промежуточное значение между Δ_{11} и Δ_{22} , т.е. $\Delta_{22} < \Delta_{12} < \Delta_{11}$, что и наблюдается при сравнении измеренных здесь величин Δ_{11} и Δ_{22} (см. вставку к рис. 4а) с Δ_{12} из эксперимента [14].

По аналогии с [1–3] мы исследовали температурное поведение равновесной туннельной проводимости $G_0 = dI/dV_b$ при $V_b = 0$, которое позволяет однозначно определить наличие/отсутствие энергетического зазора при туннелировании. Зависимости $G_0 = dI/dV_b$ при $V_b = 0$ от температуры для переходов L9-L9 и L3-L3 при $B = 4$ и 12 Тл , соответственно, представленные на рис. 5а, демонстрируют противонаправленное движение в интервале низких температур вплоть до $T \sim 10 \text{ К}$: если в случае L9-L9 проводимость плавно падает с ростом T во всем интервале температур, отражая обычное уширение УЛ, то для перехода L3-L3 равновесная туннельная проводимость сначала растет до $T \sim 10 \text{ К}$, отражая замытие туннельной щели температурой, а затем начинает медленное падение, отражая обычное уширение УЛ. Рисунок 5б представляет собой ту же зависимость G_0 ($V_b = 0$) при $B = 12 \text{ Тл}$ при туннелировании между УЛ L3-L3, только построенную от обратной температуры $1/T$, и проявляет активационное поведение G_0 при низких температурах, аналогично [1–3]. Активационный характер поведения равновесной проводимости явно указывает на наличие щели в туннельной плотности состояний. Полученная при этом величина энергии активации $E_a \sim 0.68 \text{ мэВ}$ приблизительно на порядок меньше, чем ширина щели Δ , измеренная из графика на рис. 4а. Подобное отношение $\Delta/E_a \approx 14\text{--}20$ уже наблюдалось как в GaAs гетероструктурах с двойными квантовыми ямами [1–3], так и графеновых структурах [14] и было объяснено тем, что энергия активации определяется не вели-

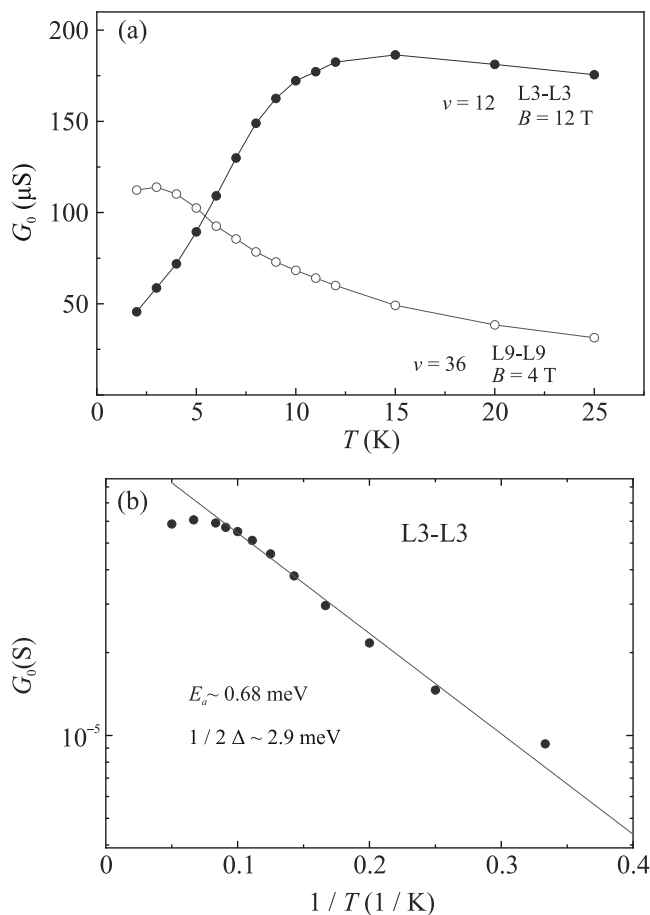


Рис. 5. (Цветной онлайн) (a) – Зависимости $G_0 = dI/dV_b$ при $V_b = 0$ от температуры для переходов L9-L9 при $B = 4$ Тл (красная) и L3-L3 при $B = 12$ Тл (синяя); (b) – Зависимость G_0 при $\nu = 12$, $B = 12$ Тл для перехода L3-L3 от обратной температуры $1/T$

чиной щели Δ , а скорее гораздо меньшей характеристической энергией коллективных возбуждений системы [24, 25]. Аналогичное подавление равновесной туннельной проводимости с понижением температуры наблюдались нами также и при переходах L2-L2 и L1-L1 (см. рис. S4 дополнительных материалов), но как отмечено выше, в данной работе мы сфокусируемся на переходах L3-L3 с сохранением параллельной слоям компоненты импульса.

В заключение важно отметить, что хотя все переходы L1-L1, L2-L2 и L3-L3 демонстрируют расщепление УЛ из-за снятия вырождения, как видно из рис. 2, любое из сечений карты на рис. S3 вдоль V_b показывает также и наличие провала проводимости в окрестности $V_b = 0$, что означает одновременное сосуществование двух этих эффектов – реальных щелей в плотности состояний из-за расщепления УЛ и

кулоновской “псевдощели” в туннельной плотности состояний.

Таким образом, было обнаружено резкое подавление проводимости в окрестности $V_b = 0$ магнитным полем при туннелировании в гетероструктурах графен/ hBN /графен и активационный характер температурной зависимости равновесной проводимости, который мы связываем с корреляционной кулоновской щелью в туннельной плотности состояний. Рост величины щели Δ с уменьшением ν также согласуется с ранними результатами для полупроводниковых систем. При этом, однако, полученная величина Δ значительно превосходит измеренные во всех предыдущих работах, что связано, вероятно, с большим масштабом циклотронных энергий в графене по сравнению с GaAs в интервале нижних УЛ и согласуется с результатами [14].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант # 23-12-00115).

1. J. P. Eisenstein, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, Phys. Rev. Lett. **69**, 3804 (1992).
2. N. Turner, J. T. Nicholls, E. H. Linfield, K. M. Brown, G. A. Jones, and D. A. Ritchie, Phys. Rev. B **54**, 10614 (1996).
3. T. Reker, Y. C. Chung, H. Im, P. C. Klipstein, R. J. Nicholas, and H. Shtrikman, J. Phys.: Condens. Matter **14**, 5561 (2002).
4. S.-R. E. Yang and A. H. MacDonald, Phys. Rev. Lett. **70**, 4110 (1993).
5. Y. Hatsugai, P.-A. Bares, and X. G. Wen, Phys. Rev. Lett. **71**, 424 (1993).
6. S. He, P. M. Platzman, and B. I. Halperin, Phys. Rev. Lett. **71**, 777 (1993).
7. P. Johansson and J. M. Kinaret, Phys. Rev. Lett. **71**, 1435 (1993).
8. P. Johansson and J. M. Kinaret, Phys. Rev. B **50**, 4671 (1994).
9. I. L. Aleiner, H. U. Baranger, and L. I. Glazman, Phys. Rev. Lett. **74**, 3435 (1995).
10. I. L. Aleiner and L. I. Glazman, Phys. Rev. B **52**, 11 296 (1995).
11. M. M. Fogler, A. A. Koulakov, and B. I. Shklovskii, Phys. Rev. B **54**, 1853 (1996).
12. L. S. Levitov and A. V. Shytov, arXiv <https://doi.org/10.48550/arXiv.cond-mat/9507058> (1995).
13. K. A. Lin, N. Prasad, G. W. Burg, B. Zou, K. Ueno, K. Watanabe, T. Taniguchi, A. H. MacDonald, and E. Tutuc, Phys. Rev. Lett. **129**, 18701 (2022).
14. E. E. Vdovin, M. T. Greenaway, Y. N. Khanin, S. V. Morozov, O. Makarovskiy, A. Patane, A. Mishchenko, S. Slizovskiy, V. Fal'ko,

- A.K. Geim, K.S. Novoselov, and L. Eaves, Commun. Phys. **6**, Article number 159 (2023); <https://doi.org/10.1038/s42005-023-01277-y>.
15. J.P. Eisenstein, L.N. Pfeiffer, and K.W. West, Phys. Rev. Lett. **74**, 1419 (1995).
16. Ю. Н. Ханин, Е. Е. Вдовин, А. Мищенко, Ж. С. Ту, А. Козиков, Р. В. Горбачев, К. С. Новоселов, Письма в ЖЭТФ **104**(5), 342 (2016).
17. Ю. Н. Ханин, Е. Е. Вдовин, И. А. Ларкин, О. Макаровский, Ю. А. Склочева, А. Мищенко, Ю. Б. Ванг, А. Козиков, Р. В. Горбачев, К. С. Новоселов, Письма в ЖЭТФ **107**(4), 243, (2018).
18. M. T. Greenaway, E. E. Vdovin, A. Mishchenko, O. Makarovskiy, A. Patane, J. R. Wallbank, Y. Cao, A. V. Kretinin, M. J. Zhu, S. V. Morozov, V. I. Fal'ko, K. S. Novoselov, A. K. Geim, T. M. Fromhold, and L. Eaves, Nat. Phys. **11**(12), 1057 (2015).
19. Y. Zhang, Z. Jiang, J. P. Small, M. S. Purewal, Y. W. Tan, M. Fazlollahi, J. D. Chudow, J. A. Jaszczak, H. L. Stormer, and P. Kim, Phys. Rev. Lett. **96**, 136806 (2006).
20. C. R. Dean, A. F. Young, I. Meric, C. Lee, L. Wang, S. Sorgenfrei, K. Watanabe, T. Taniguchi, P. Kim, K. L. Shepard, and J. Hone, Nat. Nanotechnol. **5**, 722 (2010).
21. G. L. Yu, R. Jalilb, B. Belle, A. S. Mayorov, P. Blake, F. Schedin, S. V. Morozov, L. A. Ponomarenko, F. Chiappini, S. Wiedmann, U. Zeitlerd, M. I. Katsnelson, A. K. Geim, K. S. Novoselov, and D. C. Elias, PNAS **110**, 3282 (2013).
22. E. E. Vdovin, A. Mishchenko, M. T. Greenaway, M. J. Zhu, D. Ghazaryan, A. Misra, Y. Cao, S. V. Morozov, O. Makarovskiy, T. M. Fromhold, A. Patane, G. J. Slotman, M. I. Katsnelson, A. K. Geim, K. S. Novoselov, and L. Eaves, Phys. Rev. Lett. **116**, 186603 (2016).
23. R. S. Deacon, K.-C. Chuang, R. J. Nicholas, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, Phys. Rev. B **76**, 081406 (2007).
24. P. Johansson and J. M. Kinaret, Phys. Rev. Lett. **71**, 1435 (1993).
25. R. Haussmann, Phys. Rev. B **53**, 7357 (1996).

В каком магнитном поле рождается краевой магнитоплазмон?

В. М. Муравьев¹⁾, А. М. Зарезин, П. А. Гусихин, И. В. Кукушкин

Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка, Россия

Поступила в редакцию 28 июля 2023 г.

После переработки 9 августа 2023 г.

Принята к публикации 9 августа 2023 г.

Методом оптического детектирования резонансного микроволнового поглощения исследовано поведение магнитоплазменных мод в высококачественных двумерных электронных системах (ДЭС) на базе AlGaAs/GaAs гетероструктур с мезой в форме диска. Путем анализа магнитодисперсионной зависимости удастся установить значение магнитного поля, при котором вдоль края ДЭС образуется двумерный “скин-слой” и, как следствие, магнитоплазменная мода приобретает краевой характер. Исследовано поведение этого значения магнитного поля в зависимости от электронной плотности ДЭС. Разработана модель для описания полученных экспериментальных результатов.

DOI: 10.31857/S123456782318009X, EDN: wwqjvw

Плазменные возбуждения в двумерных электронных системах (ДЭС) являются предметом активного исследования на протяжении более 50 лет [1–10]. В отличие от трехмерного случая, спектр двумерных плазмонов имеет бесщелевой сильно дисперсионный характер [1]:

$$\omega_p^2(q) = \frac{n_s e^2}{2m^* \varepsilon_0 \varepsilon} q, \quad (1)$$

где q – волновой вектор плазмона, n_s – электронная концентрация, m^* – эффективная масса двумерных электронов, ε_0 и $\varepsilon = (\varepsilon_{\text{GaAs}} + 1)/2$ – диэлектрическая проницаемость вакуума и эффективная диэлектрическая проницаемость окружающей среды. Например, для ДЭС в форме диска с диаметром d волновой вектор для фундаментальной плазменной моды $q = 2.4/d$ [11]. В перпендикулярном магнитном поле плазменный резонанс расщепляется на две моды – циклотронную и краевую [5–8]. Частота циклотронной магнитоплазменной моды в пределе большого магнитного поля стремится к частоте циклотронного резонанса $\omega_c = eB/m^*$. Частота же краевой магнитоплазменной моды (КМП) в пределе большого магнитного поля стремится к нулю.

В первом эксперименте по обнаружению КМП [5] в массиве дисков двумерных электронов была предложена теоретическая модель, описывающая магнитодисперсию КМП в рамках дипольного приближения для модели “сплюснутого” эллипсоида

$$\omega_{\text{emp}} = -\frac{\omega_c}{2} + \sqrt{\omega_p^2 + \left(\frac{\omega_c}{2}\right)^2}. \quad (2)$$

Однако в более поздних экспериментах, проводившихся в больших магнитных полях в режиме целочисленного и дробного квантовых эффектов Холла было установлено, что магнитодисперсия КМП моды значительно отклоняется от зависимости (2) [12, 13]. В частности, было обнаружено, что с изменением магнитного поля частота КМП осциллирует, а его затухание ведет себя подобно холловской проводимости. Для объяснения этих эффектов была разработана подробная теория, которая учитывала накопление заряда вблизи края ДЭС [14]. Суть подхода состояла в том, что для устранения логарифмической расходимости переменного потенциала КМП, вблизи края ДЭС феноменологически вводится полоска с шириной l , где аккумулируется заряд волны. В таком случае можно аналитически рассчитать электродинамику системы и получить выражение для ширины слоя и магнитодисперсии КМП, распространяющейся вдоль прямолинейного края полубесконечной ДЭС:

$$l = \frac{i \sigma_{xx}}{2\varepsilon_0 \varepsilon \omega}. \quad (3)$$

$$\omega_{\text{emp}} = \frac{\sigma_{xy} q}{2\pi \varepsilon_0 \varepsilon} \ln \frac{5.4}{ql}, \quad ql \ll 1. \quad (4)$$

Здесь σ_{xx} и σ_{xy} – компоненты тензора проводимости ДЭС. Рассматриваемая краевая область локализации зарядов является двумерным аналогом скин-слоя [15]. Из формулы (3) следует, что в нулевом магнитном поле $l = 1/q$. Таким образом, для ДЭС в форме диска l сравнима с его диаметром. Последующие эксперименты действительно подтвердили существование краевой области локализации зарядов КМП [16–23]. Однако вопрос о том, в каком магнит-

¹⁾e-mail: muravev_vm@mail.ru

ном поле вдоль края ДЭС образуется “скин-слой” и нижняя магнитоплазменная мода приобретает краевой характер, остается до сих пор не изученным.

Эксперименты были выполнены на высококачественных GaAs/AlGaAs гетероструктурах с шириной квантовой ямы 20 нм. Концентрация двумерных электронов в различных образцах составляла от $n_s = 0.4 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ до $1.2 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$, подвижность — от $\mu = 0.5 \times 10^6 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ до $\mu = 1.0 \times 10^6 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ при температуре $T = 4.2 \text{ К}$. Образцы представляли собой диски ДЭС с диаметром мезы $d = 0.34 \text{ мм}$. Образец помещался внутрь коаксиальной СВЧ линии, которая погружалась в криостат со сверхпроводящим магнитом. Катушка магнита позволяла создавать магнитное поле до 7 Тл в направлении, перпендикулярном поверхности образца. СВЧ излучение в частотном диапазоне от 1 МГц до 40 ГГц и мощностью до 10 мВт подавалось на вход коаксиальной линии. Другой конец линии заканчивался согласованной нагрузкой для подавления стоячих волн на длине СВЧ тракта. Такая схема монтажа образца позволяла разворачивать СВЧ частоту при практически неизменной мощности микроволнового излучения, падающего на образец. Для регистрации плазменных возбуждений в ДЭС использовалась оптическая методика детектирования микроволнового поглощения [24, 25]. Выбранная методика для измерения плазменных резонансов основана на высокой чувствительности спектра люминесценции фотовозбужденных электронов и дырок к разогреву ДЭС. При совпадении частоты микроволнового излучения с частотой плазмона двумерная электронная система начинает резонансно разогреваться, что приводит к изменению спектра люминесценции. Для фотовозбуждения и сбора сигнала люминесценции в коаксиальную линию напротив образца помещалось оптоволокно с диаметром центральной жилы 0.4 мм. При этом использовалось излучение от стабилизированного лазера с длиной волны $\lambda = 780 \text{ нм}$ и мощностью 0.1 мВт. Интеграл модуля разности спектров люминесценции под микроволновым излучением и без него служил мерой интенсивности поглощения СВЧ излучения. Все эксперименты проводились при базовой температуре на образце $T = 4.2 \text{ К}$.

На рисунке 1 показаны типичные спектры микроволнового поглощения, измеренные при различных значениях магнитного поля $B = 0, 8, 40$ и 80 мТл . Эксперименты проводились на ДЭС в форме одиночного диска с диаметром $d = 0.34 \text{ мм}$ и электронной концентрацией $n_s = 1.2 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$. В нулевом магнитном поле в спектре поглощения наблюдается возбуждение фундаментальной плазменной моды.

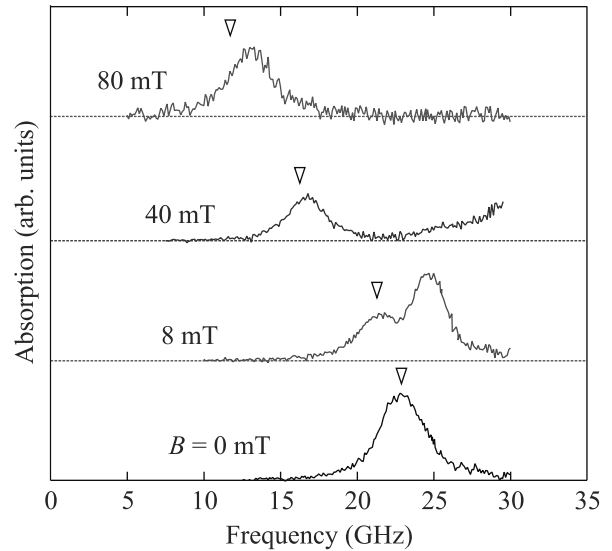


Рис. 1. (Цветной онлайн) Спектры микроволнового поглощения, измеренные при различных значениях магнитного поля. Кривые сдвинуты по вертикали для наглядности. Горизонтальными пунктирными линиями для каждой из кривых указан уровень сигнала без СВЧ облучения. Стрелками показаны положения КМП моды согласно дипольному приближению (2). Измерения проводились на диске с диаметром $d = 0.34 \text{ мм}$ и электронной концентрацией $n_s = 1.2 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$

Из полуширины резонанса $\Delta f = 2 \text{ ГГц}$ можно однозначно определить время электронной релаксации $\tau \approx 80 \text{ пс}$. При приложении внешнего магнитного поля плазменный резонанс раздваивается на две магнитоплазменные моды. Их детальное магнитное поведение представлено на рис. 2а. Пунктирной линией на рис. 2а показана частота циклотронного резонанса $\omega_c = eB/m^*$, сплошной черной линией — результат простейшей дипольной модели (2), сплошной синей линией — результат теоретической модели Волкова и Михайлова (4). Видно, что, начиная с магнитного поля $B_0 = 26 \text{ мТл}$, частота нижней магнитоплазменной моды отклоняется от теоретического предсказания. Магнитное поле B_0 определялось следующим образом. Строилось относительное отклонение частоты магнитоплазмона от формулы (2) (рис. 2б). Отклонение $\Delta f/f$ практически равно нулю до магнитного поля B_0 . После же B_0 происходит качественное изменение в поведении магнитоплазменного возбуждения и $\Delta f/f$ начинает расти линейно по магнитному полю.

Чтобы разобраться в наблюдаемом физическом явлении, мы прибегли к аналитической модели из

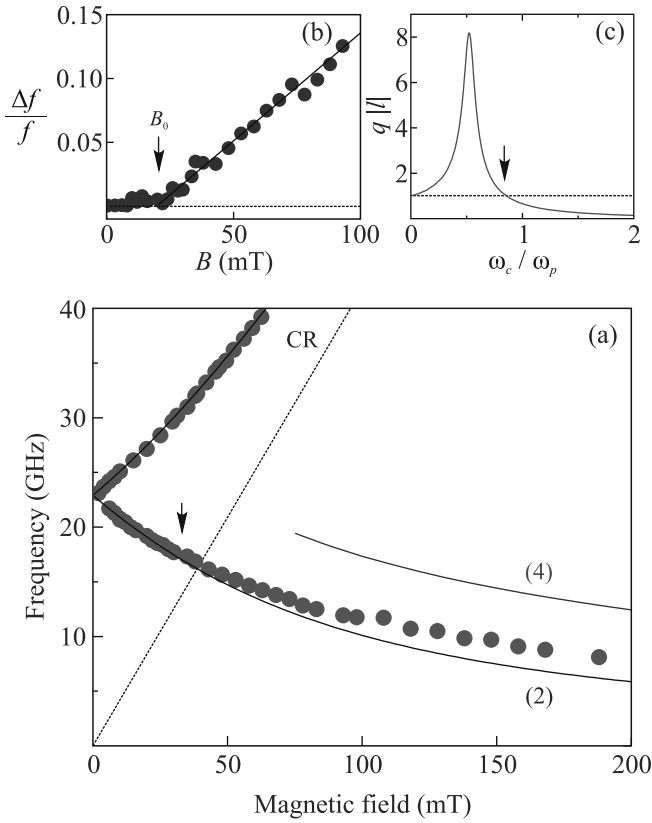


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Магнитодисперсия фундаментального плазменного возбуждения для диска с диаметром $d = 0.34$ мм. Штриховой линией (CR) показано положение циклотронного резонанса $\omega_c = eB/m^*$. Сплошными черными кривыми показана теоретическая магнитодисперсия согласно модели “сплюснутого” эллипсоида (2). Сплошной синей линией показана магнитодисперсия согласно теоретической модели Волкова и Михайлова (4). Видно, что начиная с магнитного поля 26 мТл, наблюдается существенное расхождение между экспериментом и теоретической моделью (2). (б) – Относительное отклонение частоты магнитоплазмона $\Delta f/f$ от формулы (2) в зависимости от приложенного магнитного поля B . (с) – Зависимость $q|l|$ от магнитного поля. Стрелкой показано магнитное поле, при котором $q|l| = 1$

работы [14]. Воспользуемся для двумерной проводимости, σ_{xx} , формулой Друде:

$$\sigma_{xx} = \frac{n_s e^2 \tau}{m^*} \frac{1 - i\omega\tau}{(1 - i\omega\tau)^2 + \omega_c^2 \tau^2}. \quad (5)$$

Тогда из (3) можно прямым расчетом определить размер “скин-слоя” $|l|$ в зависимости от приложенного магнитного поля (рис. 2с). Видно, что в нулевом магнитном поле $q|l| = 1$, т.е. “скин-слой” сравним с размером диска. Далее, при приложении магнитного поля $|l|$ резко увеличивается, достигает максиму-

ма и далее уменьшается до нуля в пределе бесконечно больших магнитных полей. На зависимости есть магнитное поле, когда $q|l| = 1$ (стрелка на рис. 2с). Можно считать, что в образцах конечного размера, начиная с этого магнитного поля вдоль края ДЭС образуется “скин-слой” и магнитоплазменная мода приобретает краевой характер.

Тот же результат можно получить следующим аналитическим путем. Для ширины “скин-слоя” в плазменном пределе $\omega\tau \gg 1$ из (3) можно найти следующее выражение [14]:

$$ql = \frac{\omega_p^2}{\omega_{\text{emp}}^2 - \omega_c^2}. \quad (6)$$

Отсюда следует, что размер “скин-слоя” быстро уменьшается с увеличением магнитного поля. При некотором магнитном поле его размер становится сопоставим с диаметром диска $q|l| = 1$. Для того, чтобы найти значение этого магнитного поля, найдем из формулы (2) выражение для частоты КМП моды $\omega_{\text{emp}} \approx \omega_p - \omega_c/2$. Здесь ω_p – частота плазмона в нулевом магнитном поле. Подставив в (6), находим, что в магнитном поле $\omega_c = 2\omega_p/3$ выполняется условие $q|l| = 1$. Для исследуемого образца эта точка находится в магнитном поле $B = 37$ мТл, что согласуется с $B_0 = 26$ мТл (стрелка на рис. 2б), где частота нижней магнитоплазменной моды начинает отклоняться от теоретической модели “сплюснутого” эллипсоида.

Для того, чтобы дополнительно проверить модель, мы провели эксперименты на серии образцов с одиночными дисками фиксированного диаметра $d = 0.34$ мм, но разными электронными концентрациями $n_s = 0.45, 0.62$, и $1.2 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$. Результирующая зависимость B_0 от электронной концентрации n_s представлена на рис. 3. Черной кривой на рис. 3 показана теоретическая зависимость $\omega_c = 2\omega_p/3$. Видно, что теоретическая модель на качественном уровне хорошо согласуется с экспериментальными точками. Однако количественное согласие недостаточно хорошее. Следует отметить, что формула (3), на которую мы опирались, была получена в предположении, что ДЭС представляет собой бесконечную полуплоскость. В наших же экспериментах ДЭС имеет конечный размер в форме диска. Более полная теория, учитывающая это обстоятельство, помогла бы лучше понять и описать экспериментальные данные.

В работе проведено экспериментальное исследование спектров поглощения для дисков двумерных электронов, изготовленных из высококачественных AlGaAs/GaAs гетероструктур. Установлено значение магнитного поля, при котором вдоль края ДЭС образуется двумерный “скин-слой” и, как следствие, маг-

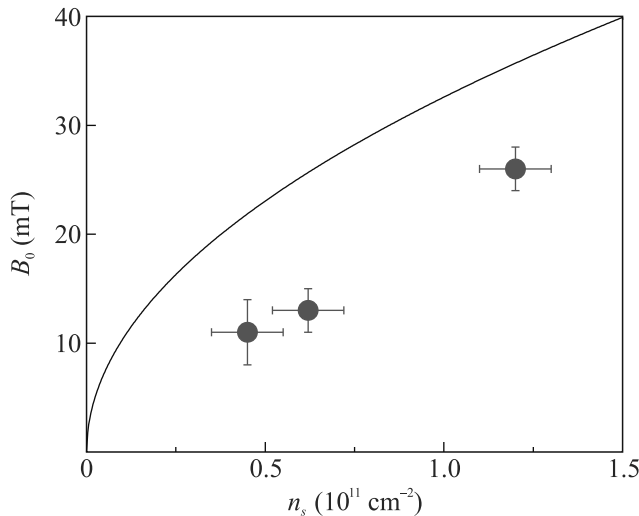


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость B_0 от электронной плотности n_s . Сплошной линией показана корневая зависимость согласно качественной теоретической модели (6)

нитеоплазменная мода приобретает краевой характер. Сравнение полученных экспериментальных данных с теоретической моделью [14] показало хорошее качественное согласие.

Работа была выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант # 21-12-00287.

Авторы благодарны В. А. Волкову, А. А. Заболотных и И. В. Загородневу за конструктивную критику и обсуждение статьи.

1. F. Stern, Phys. Rev. Lett. **18**, 546 (1967).
2. C. C. Grimes and G. Adams, Phys. Rev. Lett. **36**, 145 (1976).
3. S. J. Allen, D. C. Tsui, and R. A. Logan, Phys. Rev. Lett. **38**, 980 (1977).
4. T. N. Theis, J. P. Kotthaus, and P. J. Stiles, Solid State Commun. **24**, 273 (1977).
5. S. J. Allen, H. L. Störmer, and J. C. M. Hwang, Phys. Rev. B **28**, 4875 (1983).

6. D. B. Mast and A. J. Dahm, Physica B **126**, 457 (1984).
7. D. B. Mast, A. J. Dahm, and A. L. Fetter, Phys. Rev. Lett. **54**, 1706 (1985).
8. D. C. Glatli, E. Y. Andrei, G. Deville, J. Poitrenaud, and F. I. B. Williams, Phys. Rev. Lett. **54**, 1710 (1985).
9. D. A. Bandurin, D. Svintsov, I. Gayduchenko et al. (Collaboration), Nat. Commun. **9**, 5392 (2018).
10. D. Mylnikov and D. Svintsov, Phys. Rev. Appl. **17**, 064055 (2022).
11. I. V. Kukushkin, J. H. Smet, S. A. Mikhailov, D. V. Kulakovskii, K. von Klitzing, and W. Wegscheider, Phys. Rev. Lett. **90**, 156801 (2003).
12. С. А. Говорков, М. И. Резников, А. П. Сеничкин, В. И. Тальянский, Письма в ЖЭТФ **44**, 380 (1986).
13. В. А. Волков, Д. В. Галченков, Л. А. Галченков, И. М. Гродненский, О. Р. Матов, С. А. Михайлов, Письма в ЖЭТФ **44**, 510 (1986).
14. В. А. Волков, С. А. Михайлов, ЖЭТФ **94**, 217 (1988).
15. С. И. Дорожкин, А. А. Шашкин, Н. Б. Житенев, В. Т. Долгополов, Письма в ЖЭТФ **44**, 189 (1986).
16. I. M. Grodnensky, D. Heitmann, K. von Klitzing, and A. Yu. Kamaev, Phys. Rev. B **44**, 1946(R) (1991).
17. V. I. Talyanskii, A. V. Polisski, D. D. Arnone, M. Pepper, C. G. Smith, D. A. Ritchie, J. E. Frost, and G. A. C. Jones, Phys. Rev. B **46**, 12427 (1992).
18. N. B. Zhitenev, R. J. Haug, K. von Klitzing, and K. Eberl, Phys. Rev. Lett. **71**, 2292 (1993).
19. N. B. Zhitenev, R. J. Haug, K. von Klitzing, and K. Eberl, Phys. Rev. B **49**, 7809 (1994).
20. C. Dahl, S. Manus, J. P. Kotthaus, H. Nickel, and W. Schlapp, Appl. Phys. Lett. **66**, 2271 (1995).
21. M. I. Goksu and A. J. Dahm, J. Low Temp. Phys. **134**, 553 (2004).
22. М. Н. Ханнанов, А. А. Фортунатов, И. В. Кукушкин, Письма в ЖЭТФ **93**, 736 (2011).
23. Д. В. Сметнев, В. М. Муравьев, И. В. Андреев, И. В. Кукушкин, Письма в ЖЭТФ **94**, 141 (2011).
24. I. V. Kukushkin, J. H. Smet, K. von Klitzing, W. Wegscheider, Nature (London) **415**, 409 (2002).
25. V. M. Muravev, I. V. Andreev, S. I. Gubarev, V. N. Belyanin, and I. V. Kukushkin, Phys. Rev. B **93**, 041110(R) (2016).

Невзаимность проявления флексомагнитоэлектрического эффекта относительно знака воздействующих зарядов

Е. Б. Магадеев¹⁾, Р. М. Вахитов¹⁾

Уфимский университет науки и технологий, 450076 Уфа, Россия

Поступила в редакцию 10 июля 2023 г.

После переработки 11 августа 2023 г.

Принята к публикации 17 августа 2023 г.

В работе теоретически исследуется ферромагнитная пленка, находящаяся в электрическом поле заряженного проводника. Показано, что при наличии неоднородного магнитоэлектрического взаимодействия в такой пленке могут формироваться уединенные магнитные неоднородности, структура и условия зарождения которых определяются знаком воздействующих зарядов. В частности, установлено, что минимальное значение модуля линейной плотности заряда, при которой начинает формироваться неоднородность, в несколько раз отличается для положительно и отрицательно заряженных проводников.

DOI: 10.31857/S1234567823180106, EDN: wwwors

Введение. Несмотря на то, что неоднородное магнитоэлектрическое взаимодействие (НМЭВ) и связанный с ним флексомагнитоэлектрический эффект проявляются в сравнительно узком классе материалов (преимущественно в ферритах-гранатах) [1, 2], уровень интереса к их возможному практическому применению остается довольно высоким. Это связано, с одной стороны, с развитием представлений о вихреподобных неоднородностях различного типа (скирмионах, бимеронах и т.д. [3]), которые считаются перспективными для разработки устройств наноэлектроники. В рамках данного направления НМЭВ, равно как и взаимодействие Дзялошинского–Мория [4], можно рассматривать в качестве фактора, стабилизирующего неоднородности указанного типа [5], причем НМЭВ обладает рядом преимуществ, в частности, из-за возможности непосредственно влиять на интенсивность взаимодействия через величину прикладываемого электрического поля. Другой важной сферой применения НМЭВ является управление доменной структурой магнетика без необходимости создания магнитных полей [6–8], что крайне важно с позиций энергосбережения. Отметим, что реализуемость данного подхода на практике уже получила экспериментальное подтверждение [9].

Поскольку на феноменологическом уровне описания ферромагнитная пленка представляет собой однородный электрически нейтральный объект, можно было бы ожидать, что одновременная смена знаков всех воздействующих на нее зарядов не должна качественно повлиять на картину наблюдаемых явлений.

Действительно, в ряде работ по обсуждаемой тематике (см., например, [8, 10]) направление внешнего электрического поля выбирается условно, так как предполагается, что структуры, формирующиеся под влиянием НМЭВ в полях, которые отличаются только направлением, совпадают друг с другом с точностью до какого-либо преобразования симметрии. Тем не менее, в общем случае данное утверждение неверно. Это вполне очевидно с микроскопической точки зрения, поскольку отрицательно и положительно заряженные частицы играют далеко не равную роль в физике магнитных явлений. В данной работе на примере пленки, помещенной в поле заряженного проводника, будет показано, что эта асимметрия может проявиться также и на макроскопическом уровне: в зависимости от знака заряда проводника распределение намагниченности в пленке может вести себя совершенно неодинаково.

1. Описание модели. Рассмотрим тонкую ферромагнитную пленку, параллельно которой на расстоянии H расположен бесконечный прямолинейный проводник с постоянной линейной плотностью электрического заряда λ (см. рис. 1). Тогда напряженность поля $\mathbf{E}$, создаваемого проводником, будет меняться вдоль перпендикулярной его направлению оси Ox , а значит, единичный вектор намагниченности $\mathbf{m}$ также будет зависеть от единственной пространственной координаты x . Для наглядности рассуждений ограничимся случаем, когда материал образца характеризуется сильной легкоплоскостной анизотропией, ось которой нормальна поверхности пленки (наличие анизотропии, близкой к одноосной, вполне характерно для ферритов-гранатов, в

¹⁾e-mail: magadeeev@gmail.com; vakhitovrm@yahoo.com

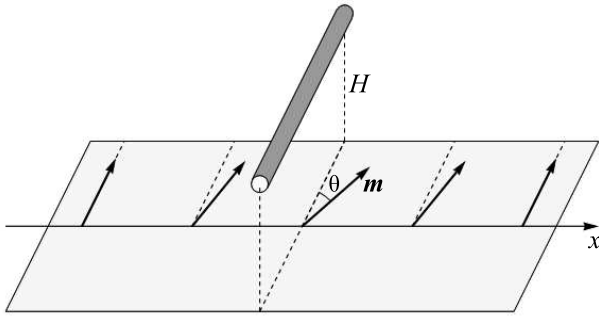


Рис. 1. Геометрия задачи

которых наблюдается НМЭВ [10]). Тогда вектор $\mathbf{m}$ практически не будет выходить из плоскости пленки, и его направление можно приближенно задать одним углом θ , так что $m_x = \sin \theta$, $\theta(x \rightarrow \pm\infty) = 0$. С учетом вклада размагничивающих полей представим полную энергию магнетика в следующем виде [11, 12]:

$$E_{\text{tot}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[A \left(\frac{d\theta}{dx} \right)^2 + 2\pi M_s^2 \sin^2 \theta + \Phi_{ME} \right] S dx. \quad (1)$$

Здесь A – обменный параметр, M_s – намагниченность насыщения, S – площадь сечения пленки плоскостью, нормальной оси Ox , а Φ_{ME} – плотность энергии НМЭВ, впервые введенная в работах [13, 14] и определяемая соотношением

$$\Phi_{ME} = M_s^2 \mathbf{E} (b_1 \mathbf{m} \operatorname{div} \mathbf{m} + b_2 \mathbf{m} \times \operatorname{rot} \mathbf{m}), \quad (2)$$

где b_1 и b_2 – константы НМЭВ [6, 10].

Выражая в формуле (2) вектор $\mathbf{m}$ через угол θ , несложно убедиться, что $\Phi_{ME} \sim \frac{d\theta}{dx}$. Следовательно, в выражении (1) становится возможно интегрирование по частям, что позволяет записать плотность энергии НМЭВ в альтернативной форме:

$$\tilde{\Phi}_{ME} = -\frac{1}{2} M_s^2 (b_1 - b_2) \frac{dE_x}{dx} \sin^2 \theta. \quad (3)$$

Отметим, что дополнительное слагаемое в энергии, возникающее в результате интегрирования по частям, в данном случае пропорционально разности значений $E_x \sin^2 \theta$ на границах образца, вследствие чего им заведомо можно пренебречь из-за малости обеих величин E_x и $\sin \theta$ при $|x| \gg H$. Из формул (1) и (3) видно, что в рассматриваемом случае влияние как размагничивающих полей, так и НМЭВ сводится к появлению эффективной одноосной анизотропии, константа которой модулирована в пространстве. Это имеет аналогию с механизмом индуцированного электрическим полем изменения одноосной

анизотропии, изложенным в [15] (а также более подробно в [16, 17] применительно к объяснению флексомагнитоэлектрического эффекта [1]). В тех областях, где функция $E_x(x)$ меняется достаточно быстро, возрастающая при $b_1 > b_2$ или убывающая при $b_1 < b_2$, направление Ox может оказаться осью легкого намагничивания, что, в свою очередь, может привести к формированию уединенной магнитной неоднородности. Тем не менее, при замене всех воздействующих на пленку зарядов на противоположные (что эквивалентно замене напряженности поля $\mathbf{E}$ на $-\mathbf{E}$ одновременно во всех точках образца) области возрастания и убывания функции $E_x(x)$ меняются местами, из-за чего пространственное распределение константы эффективной анизотропии претерпевает существенные изменения. В частности, может оказаться, что направление Ox уже не является осью легкого намагничивания ни в одной из точек образца, вследствие чего формирование неоднородных структур становится заведомо невыгодным. Конечно, такая ситуация не может иметь места, если, например, функция $E_x(x)$ является четной: в этом случае замена $\mathbf{E}$ на $-\mathbf{E}$ приведет лишь к отражению имеющегося распределения намагниченности относительно плоскости $x = 0$. В общем случае, однако, такая замена будет вызывать перестроение наблюдаемых магнитных структур на качественном уровне, так что проявления флексомагнитоэлектрического эффекта, обусловленные наличием члена (3) в плотности энергии магнетика, оказываются независимыми относительно знака воздействующих зарядов. Отметим, что член (3) исчезает при условии равенства констант НМЭВ (данное допущение встречается в ряде работ по тематике НМЭВ; см., например, [5]), поэтому далее будем полагать $b_1 \neq b_2$.

Переходя к конкретному виду зависимости $E_x(x)$, заметим, что в простейшем случае, когда проводник на рис. 1 является бесконечно тонким, а диэлектрические проницаемости как магнетика, так и среды, в которой находится проводник, близки к диэлектрической проницаемости вакуума, имеет место известное соотношение $E_x(x) = 2\lambda x / (x^2 + H^2)$. На практике, однако, необходимо учитывать два важных обстоятельства. Во-первых, из-за конечных размеров проводника под величиной H следует понимать не ширину зазора между пленкой и проводником, а расстояние от поверхности пленки до оси проводника. В частности, когда зазор мал или вообще отсутствует (проводник контактирует с поверхностью пленки) величина H представляет собой, по сути, радиус проводника. Во-вторых, в случае отличных от единицы

относительных диэлектрических проницаемостей ε_1 и ε_2 магнетика и среды соответственно в приведенной выше формуле для E_x появляется дополнительный множитель $2/(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)$. Для наглядности будем включать этот множитель в параметр λ , понимая под ним линейную плотность заряда проводника, умноженную на постоянную величину $2/(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)$. С учетом этих оговорок и указанного вида функции $E_x(x)$ из формул (1) и (3) получаем следующее выражение для приведенной энергии магнетика:

$$\varepsilon = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\left(\frac{d\theta}{d\xi} \right)^2 + (h^2 + Zf(\xi)) \sin^2 \theta \right] d\xi, \quad (4)$$

где введены безразмерные величины

$$\varepsilon = HE_{\text{tot}}/(AS), \quad \xi = x/H,$$

$$h = H\sqrt{2\pi M_s^2/A}, \quad Z = M_s^2(b_1 - b_2)\lambda/A,$$

а также функция $f(\xi) = \frac{\xi^2 - 1}{(\xi^2 + 1)^2}$, график которой показан на рис. 2. Из формулы (4) видно, что при

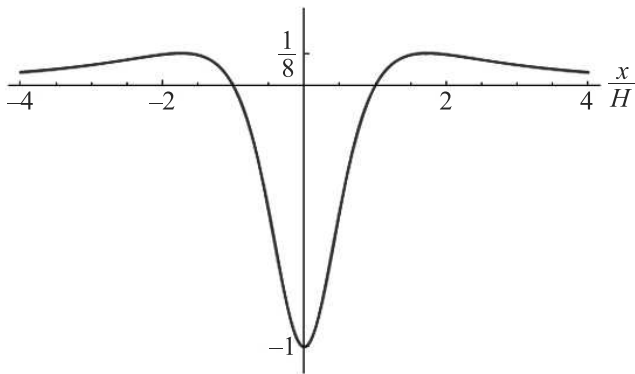


Рис. 2. (Цветной онлайн) График функции $f(x/H)$

небольших по абсолютной величине значениях нормированной плотности заряда Z минимуму энергии ε может отвечать только однородное распределение намагниченности $\theta \equiv 0$, поэтому условие формирования магнитной неоднородности может быть представлено в виде $|Z| > Z_m$. Далее будет показано, что как критическое значение модуля плотности заряда Z_m , так и структура наблюдаемых неоднородностей оказываются неодинаковыми для случаев $Z > 0$ и $Z < 0$.

2. Результаты численных расчетов. На рисунке 3 показаны зависимости $\theta(x/H)$, полученные путем численной минимизации энергии (4) при $h = 1$ и $Z = \pm 20$. Несложно видеть, что при $Z = 20$ (синяя кривая) наибольший угол θ отклонения вектора

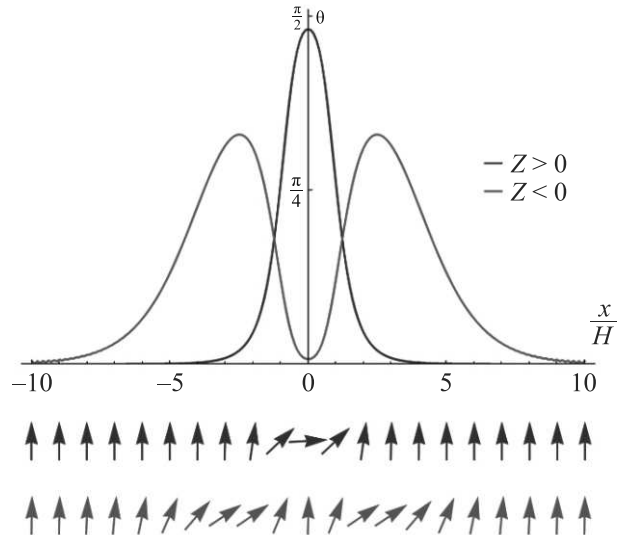


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость угла θ от координаты x при $h = 1$ и $Z = \pm 20$. Под графиком схематически показаны соответствующие данной зависимости направления вектора намагниченности в различных точках образца при $Z = 20$ (синие стрелки) и $Z = -20$ (красные стрелки)

намагниченности достигается при $x = 0$, т.е. в непосредственной близости от заряженного проводника. Напротив, при $Z = -20$ (красная кривая) зависимость θ от x имеет минимум при $x = 0$, так что наблюдаемая магнитная структура, фактически, распадается на две симметрично расположенные неоднородности. Данное различие в распределениях намагниченности объясняется тем, что при $Z > 0$ область, в которой направление Ox становится легкой осью, лежит в окрестности минимума функции f (см. рис. 2), а при $Z < 0$ такие области лежат в окрестности двух максимумов, в то время как при $|x| < H$ отклонение вектора намагниченности от направления $\theta = 0$ существенно затрудняется.

Независимо от знака величины Z , введем обозначение θ_{max} для наибольшего значения угла отклонения θ при заданных h и $|Z|$ (соответственно, при $Z > 0$ величина θ_{max} представляет собой значение θ при $x = 0$). Зависимость θ_{max} от $|Z|$, рассчитанная при $h = 1$, показана на рис. 4. При $Z \rightarrow \pm\infty$ значения угла θ_{max} , как и следовало ожидать, выходят на горизонтальную асимптоту $\theta_{\text{max}} = \pi/2$: ясно, что вектор $\mathbf{m}$ ни при каких условиях не может “проскочить” направление оси Ox . Другой общей особенностью синей ($Z > 0$) и красной ($Z < 0$) кривых на рис. 4 является то, что при небольших значениях $|Z|$ в обоих случаях $\theta_{\text{max}} = 0$, т.е. распределение намагниченности оказывается однородным. Отсюда мож-

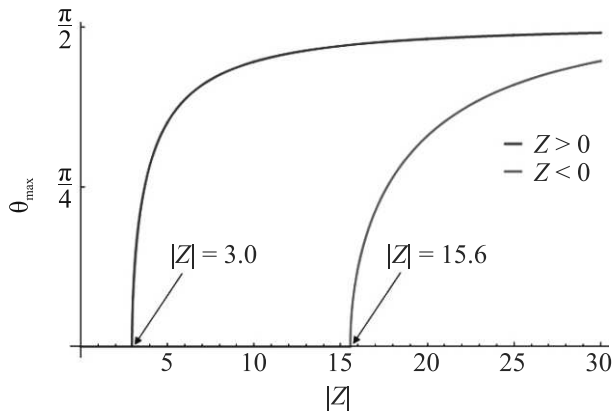


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимость наибольшего значения угла отклонения вектора намагниченности $\theta_{\max}$ от нормированной плотности заряда проводника Z при $h = 1$

но заключить, что при $h = 1$ критическое значение модуля плотности заряда Z_m составляет около 3.0 в случае $Z > 0$ и около 15.6 в случае $Z < 0$. Таким образом, при смене знака зарядов величина Z_m меняется в несколько раз, благодаря чему обсуждаемая невязанность проявления флексомагнитоэлектрического эффекта должна легко обнаруживаться экспериментально: к примеру, при плотности заряда проводника $Z = 10$ вектор намагниченности вблизи него будет поворачиваться почти на $\pi/2$ (см. рис. 4), в то время как при $Z = -10$ однородное распределение намагниченности вообще не исказится под действием внешнего поля. Ниже будет показано, что аналогичная картина наблюдается не только при $h = 1$, но также и при любом другом расстоянии между проводником и пленкой.

Отметим, что поведение кривых на рис. 4 в окрестностях точек $|Z| = Z_m$ свидетельствует о бифуркационном сценарии зарождения магнитных неоднородностей. При $|Z| < Z_m$ однородное распределение $\theta \equiv 0$ отвечает единственному экстремуму функционала (4). При $|Z| > Z_m$, помимо этого экстремума, появляются еще два, поскольку рассматриваемый функционал инвариантен относительно замены θ на $-\theta$ (в частности, наряду с каждым из распределений, показанных на рис. 3, может реализоваться также структура, симметричная данной структуре относительно плоскости $x = 0$; таким структурам, вообще говоря, должны соответствовать дополнительные ветви графиков на рис. 4 с $\theta_{\max} < 0$, симметричные показанным ветвям относительно горизонтальной оси, в результате чего и возникает рисунок “вилки”, характерный для бифуркаций). Эти новые экстремумы (конкретный выбор

между ними определяется механизмом спонтанного нарушения симметрии) минимизируют энергию системы, в то время как состояние $\theta \equiv 0$ становится неустойчивым. Таким образом, устойчивость однородного распределения намагниченности гарантирует отсутствие других возможных минимумов энергии, что будет неявно использовано при дальнейших рассуждениях.

3. Количественная теория явления. Грубую оценку снизу для величины Z_m можно получить уже из того условия, что для формирования магнитной неоднородности направление Ox должно быть осью легкого намагничивания хотя бы в каких-то точках образца. Отсюда с учетом (4) и вида функции f (см. рис. 2) получаем:

$$Z_m > \begin{cases} h^2, & Z > 0, \\ 8h^2, & Z < 0. \end{cases} \quad (5)$$

Чтобы вычислить точные значения Z_m , выясним, при каких Z однородное распределение $\theta \equiv 0$ перестает минимизировать функционал (4). Для этого рассмотрим произвольное малое возмущение $|\theta| \ll 1$ и разложим его по ортонормированному базису, образованному собственными функциями ψ_n оператора

$$\hat{L} = -\frac{d^2}{d\xi^2} + Zf(\xi), \quad (6)$$

так что $\theta = \sum_n C_n \psi_n$ (поскольку спектр оператора является смешанным, под суммированием здесь и далее подразумевается в том числе и интегрирование по непрерывной части спектра, а коэффициенты C_n могут быть комплексными). Тогда, сохраняя в (4) только члены, квадратичные по возмущению θ , имеем:

$$\varepsilon = \sum_n (h^2 + \mu_n) |C_n|^2, \quad (7)$$

где μ_n – собственные значения оператора (6), отвечающие собственным функциям ψ_n . Из полученного выражения можно сделать два важных вывода. Во-первых, магнитные неоднородности начинают зарождаться тогда, когда хотя бы какой-то из множителей в скобках в сумме (7) становится отрицательным, что гарантирует неустойчивость однородного распределения с $\varepsilon = 0$. Следовательно,

$$\mu_{\min}(Z = \pm Z_m) = -h^2, \quad (8)$$

где $\mu_{\min}$ – наименьшее из собственных значений оператора (6), которое рассматривается как функция величины Z . Во-вторых, при незначительном превышении величиной $|Z|$ критического значения Z_m

зарождение неоднородной структуры будет обусловлено преимущественно ростом коэффициента C_n перед собственной функцией $\psi_{\min}$, отвечающей $\mu_{\min}$ (подробное обоснование этой идеи в схожей ситуации дано в работе [18]). Тем самым возникающее распределение намагниченности будет определяться формой этой собственной функции: $\theta \sim \psi_{\min}$. Проводя очевидную аналогию между оператором (6) и гамильтонианом в уравнении Шредингера, заметим, что $\psi_{\min}$ представляет собой волновую функцию основного состояния частицы, движущейся в потенциальном поле $Zf(\xi)$. При $Z > 0$ частица локализуется в потенциальной яме, расположенной в области $|x| < H$ (см. рис. 2). В то же время при $Z < 0$ в этой области возникает не яма, а потенциальный барьер, и частица обнаруживается в двух бесконечно протяженных потенциальных ямах, имеющих минимумы при $x = \pm\sqrt{3}H$. Несложно видеть, что графики функции θ , показанные на рис. 3, полностью согласуются с этой логикой, хотя превышение $|Z|$ над Z_m является довольно существенным.

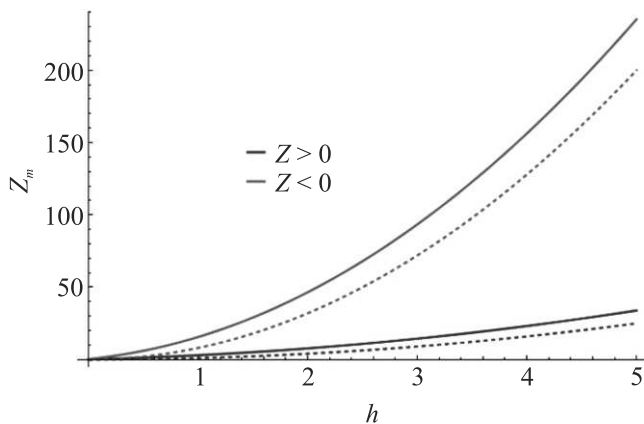


Рис. 5. (Цветной онлайн) Зависимость критического значения Z_m нормированной плотности заряда проводника Z от нормированного расстояния h между проводником и пленкой. Сплошными линиями показаны точные значения Z_m , а штриховыми — значения, полученные на основе грубой оценки снизу

Соотношение (8) можно рассматривать как уравнение относительно Z_m . На рисунке 5 показаны две ветви его решения, соответствующие случаям $Z > 0$ (синяя сплошная линия) и $Z < 0$ (красная сплошная линия). На этом же рисунке для сравнения приведены кривые, отвечающие оценке (5) (штриховые линии). Таким образом, данная оценка и впрямь является весьма грубой. Тем не менее, отношение значений Z_m для зарядов разных знаков при одном и том же h , действительно, составляет около 8 при $h \gg 1$ и лежит в диапазоне от 6 до 8, если $h > 2$. Это

подтверждает высказанный ранее тезис о том, что невязанность проявления флексомагнитоэлектрического эффекта относительно знака воздействующих зарядов может быть проверена экспериментально с большой достоверностью: если для данного магнетика $b_1 > b_2$, то для искажения однородного распределения отрицательными зарядами потребуется почти на порядок большая плотность заряда λ , чем при воздействии положительными зарядами (и наоборот, если $b_1 < b_2$).

Отметим, что точные значения Z_m могут отличаться от оценки (5) в разы, но все же не на порядок. Это позволяет использовать ее для оценки порядка величины зарядов, необходимых для наблюдения обсуждаемого явления: минимальный модуль плотности заряда $|\lambda|$, при котором под действием поля проводника начинает формироваться магнитная неоднородность, примерно в 10 раз превышает величину $H^2/|b_1 - b_2|$ при $Z > 0$ и примерно в 100 раз при $Z < 0$. Удобство этой оценки заключается в том, что она ожидаемо не зависит от величины обменного параметра A , так как опирается, по сути, лишь на способность НМЭВ конкурировать с влиянием размагничивающих полей.

Закключение. Допущение о наличии сильной анизотропии типа “легкая плоскость”, лежащее в основе рассмотренной модели, разумеется, несколько ограничивает применимость количественных результатов, полученных в данной работе: большинство материалов, в которых наблюдается флексомагнитоэлектрический эффект, нельзя считать даже строго магнитоодноосными. Тем не менее, причина продемонстрированного здесь эффекта невязанности кроется не в анизотропии магнетика, а в самом НМЭВ: возможность появления членов типа (3) является неотъемлемым следствием феноменологической теории, приводящей к представлению плотности энергии НМЭВ в форме (2). Тем самым следует ожидать, что описанное явление будет в той или иной степени проявляться в произвольных материалах при условии, что симметрия кристалла не запрещает ни наличия самого НМЭВ, ни неравенства характеризующих его констант. В этом смысле эксперименты с изменением знака воздействующих зарядов (или знака потенциала электрического зонда) могут стать полезным инструментом для изучения особенностей магнитных материалов. Отметим также, что неравенство констант НМЭВ, по всей видимости, не является необходимым условием для качественно различного поведения магнитных структур в полях, создаваемых положительными и отрицательными зарядами. Поиск достаточно простых моделей, иллю-

стрирующих данное утверждение, станет предметом дальнейших исследований.

Авторы благодарят за финансовую поддержку в ходе данной работы государственное задание на выполнение научных исследований лабораториями (приказ MN-8/1356 от 20.09.2021).

1. А. С. Логгинов, Г. А. Мешков, А. В. Николаев, А. П. Пятаков, Письма в ЖЭТФ **86**, 124 (2007).
2. I. S. Veshchunov, S. V. Mironov, W. Magrini, V. S. Stolyarov, A. N. Rossolenko, V. A. Skidanov, J.-B. Trebbia, A. I. Buzdin, Ph. Tamarat, and B. Lounis, Phys. Rev. Lett. **115**, 027601 (2015).
3. K. Everschor-Sitte, J. Masell, R. M. Reeve, and M. Kläui, J. Appl. Phys. **124**, 240901 (2018).
4. А. С. Самардак, А. Г. Колесников, А. В. Давыденко, М. Е. Стеблый, А. В. Огнев, ФММ **123**, 260 (2022).
5. G. A. Meshkov, A. P. Pyatakov, A. D. Belanovsky, K. A. Zvezdin, and A. S. Logginov, J. Magn. Soc. Jpn. **36**, 45 (2012).
6. I. Dzyaloshinskii, Europhys. Lett. **83**, 67001 (2008).
7. F. A. Maksutova, R. V. Solonetskiy, R. M. Vakhitov, and A. P. Pyatakov, Europhys. Lett. **129**, 27004 (2020).
8. Р. М. Вахитов, Р. В. Солонецкий, А. Р. Низямова, ФММ **124**, 10 (2023).
9. Д. П. Куликова, А. П. Пятаков, Е. П. Николаева, А. С. Сергеев, Т. Б. Косых, З. А. Пятакова, А. В. Николаев, А. К. Звездин, Письма в ЖЭТФ **104**, 196 (2016).
10. Р. М. Вахитов, З. В. Гареева, Р. В. Солонецкий, Ф. А. Мажитова, ФТТ **61**, 1120 (2019).
11. Е. Б. Магадеев, Р. М. Вахитов, Р. Р. Канбеков, ЖЭТФ **162**, 417 (2022).
12. E. B. Magadeev, R. M. Vakhitov, and R. R. Kanbekov, Europhys. Lett. **142**, 26001 (2023).
13. В. Г. Барьяхтар, В. А. Львов, Д. А. Яблонский, Письма в ЖЭТФ **37**, 565 (1983).
14. A. Sparavigna, A. Strigazzi, and A. Zvezdin, Phys. Rev. B **50**, 2953 (1994).
15. А. Ф. Кабыченков, Ф. В. Лисовский, Е. Г. Мансветова, Письма в ЖЭТФ **97**, 304 (2013).
16. А. Ф. Кабыченков, Ф. В. Лисовский, ЖЭТФ **145**, 733 (2014).
17. Г. В. Арзамасцева, А. М. Балбашов, Ф. В. Лисовский, Е. Г. Мансветова, А. Г. Темирязов, М. П. Темирязева, ЖЭТФ **147**, 793 (2015).
18. Е. Б. Магадеев, Р. М. Вахитов, Р. Р. Канбеков, ЖЭТФ **163**, 78 (2023).

Голдстоуновская мода скирмионного кристалла

В. Е. Тимофеев¹⁾, Д. Н. Аристов

НИИ “Курчатовский институт”, Петербургский институт ядерной физики, 188300 Гатчина, Россия

Санкт-Петербургский государственный университет, 199034 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 2 августа 2023 г.

После переработки 14 августа 2023 г.

Принята к публикации 15 августа 2023 г.

В работе обсуждается голдстоуновская мода скирмионного кристалла в модели двумерного ферромагнетика с взаимодействием Дзялошинского–Мории во внешнем магнитном поле. В подходе стереографической проекции строится конфигурация скирмионного кристалла, после чего рассматривается поле смещений скирмионов. В силу небольшого перекрытия стереографических образов потенциальная энергия выражается в терминах смещений только ближайших соседей. В работе найден общий вид дисперсии голдстоуновской моды, а также изучена зависимость параметров от магнитного поля. В квазиклассическом формализме найдена функция Грина, показано, что распространение смещений в кристалле меняет свою тензорную структуру с изотропной на анизотропную на больших расстояниях.

DOI: 10.31857/S1234567823180118, EDN: wwxbhc

Введение. Магнитные скирмионы – топологически нетривиальные вихри локальной намагниченности. Благодаря топологической защищенности, маленьким размерам и возможности манипуляции положением скирмионов при помощи спиновых токов, магнитные скирмионы могут послужить основой для разработки новейших устройств беговой памяти [1], а также арифметико-логических устройств [2].

В определенном смысле магнитный скирмион [3] – это чрезвычайно маленький магнитный пузырь [4] (цилиндрическая доменная стенка [5]). В терминах описания доменных стенок радиус скирмиона сопоставим с шириной доменной стенки и определяется величиной взаимодействия Дзялошинского–Мории (ДМ) [3, 6].

Как правило, для описания динамики локальной намагниченности используется уравнение Ландау–Лифшица–Гильберта (ЛЛГ). При описании движения доменной стенки как целого из уравнения ЛЛГ может быть получено уравнение Тиле [7]. Уравнение Тиле и его обобщения [8] являются главным инструментом анализа движения скирмионов [9]. В частности, уравнение Тиле допускает учет влияния спиновых токов на движение скирмионов и позволяет обсуждать движение скирмиона на треке, см., например, [9].

В решетках без центра инверсии с взаимодействием ДМ магнитные скирмионы зачастую упорядочи-

ваются в регулярные решетки [10–12]. Такие решетки, также называемые скирмионными кристаллами (СкК) [13], образуются в случае, когда одиночный скирмион обладает меньшей энергией по сравнению с однородной конфигурацией, магнитной спиралью или конической конфигурацией [14]. Ранее нами было показано, что при плотной упаковке скирмионов, помимо парного отталкивающего взаимодействия между скирмионами, возникает притягивающее взаимодействие в тройках скирмионов [15]. Таким образом движение отдельных скирмионов в решетке не сводится к движению уединенного скирмиона в потенциальной яме.

Возбуждения в СкК обладают сложной зонной структурой [16–19]. Возбуждения с разной угловой симметрией отвечают различным деформационным модам отдельных скирмионов, таким как: эллиптическая, дыхательная, вращение по часовой стрелке, против часовой стрелки и др. Моды с определенной симметрией [20] проявляются в экспериментах по магнитному резонансу [21].

Мягкая голдстоуновская мода СкК, также называемая гиротропной модой, ассоциируется со смещением скирмионов в СкК и впервые обсуждалась в работе [22]. СкК в ней рассматривался как суперпозиция трех магнитных спиралей с соответствующими сдвигами фаз, и было показано, что наличие топологического члена в лагранжиане приводит к квадратичной дисперсии мягкой моды (что недавно было подтверждено численно в работе [23]). Гиротропная

¹⁾e-mail: Victor.Timofeev@thd.npni.spb.ru

мода не проявляется в экспериментах по магнитному резонансу [24], однако видна в неупругом рассеянии нейтронов [25].

В этой работе мы рассматриваем простейшую модель нецентросимметричного ферромагнетика с взаимодействием ДМ во внешнем магнитном поле, в котором СкК является основным состоянием в широком диапазоне параметров. Мы используем подход стереографической проекции, позволяющий оставаться в парадигме скирмионов как квазичастиц, и рассматриваем поле смещений положений скирмионов в решетке. Мы численно показываем применимость приближения ближайших соседей и получаем замкнутое выражение для дисперсии голдстоуновской моды. Мы также находим зависимость силовых констант от внешнего магнитного поля. Показано, что динамическая функция Грина смещений изотропна на малых расстояниях, в то время как на промежуточных расстояниях ее тензорная структура анизотропна.

Модель. Мы рассматриваем плоскую модель нецентросимметричного ферромагнетика с взаимодействием ДМ в однородном магнитном поле, перпендикулярном плоскости. Плотность энергии такой модели дается выражением:

$$\mathcal{E} = \frac{C}{2} \partial_\mu S_i \partial_\mu S_i - D \epsilon_{\mu ij} S_i \partial_\mu S_j - B S_3, \quad (1)$$

где C – параметр обменного взаимодействия, D – величина взаимодействия ДМ, а B – величина внешнего магнитного поля. Удобно выбрать единицы измерения в модели (1) следующим образом: мы будем измерять длину в единицах $l = C/D$, а плотность энергии в единицах $CS^2 l^{-2} = S^2 D^2 / C$. Тогда энергия будет зависеть только от одного безразмерного параметра $b = BC/SD^2$. Мы рассматриваем предел низких температур, когда локальная намагниченность насыщена, и ее модуль не меняется от точки к точке $\mathbf{S} = S\mathbf{n}$, где $|\mathbf{n}| = 1$. Такая двумерная модель применима также к тонким пленкам, толщина которых меньше или порядка l . Мы опускаем магнитодипольное взаимодействие, поскольку в нашем случае оно может быть сведено к одноосной анизотропии, а небольшая анизотропия приведет лишь к незначительным изменениям параметров СкК.

Подход стереографической проекции позволяет выразить компоненты вектора $\mathbf{n}$ следующим образом:

$$n_1 + in_2 = \frac{2f}{1 + f\bar{f}}, \quad n_3 = \frac{1 - f\bar{f}}{1 + f\bar{f}}, \quad (2)$$

здесь f – комплекснозначная функция, а $\bar{f}$ – ком-

плексно сопряженная к ней. Стереографический образ единичного скирмиона удобно записать в виде:

$$f_1 = \frac{i z_0 \kappa(z\bar{z}/z_0^2)}{\bar{z}}, \quad (3)$$

где κ – гладкая вещественная профильная функция, z_0 – параметр, связанный с размером скирмиона. Анзац (3) наиболее удобен для описания случая СкК, в то же время он полностью воспроизводит профиль полученный в рамках анзаца цилиндрической доменной стенки для уединенного скирмиона. Ранее было показано, что стереографический образ мультискирмионной конфигурации может быть с хорошей точностью представлен суммой стереографических образов отдельных скирмионов [15]. В частности, СкК описывается следующей функцией:

$$f_{SkK} = \sum_{n,m} f_1(\mathbf{r} - n\mathbf{a}_1 - m\mathbf{a}_2), \quad (4)$$

где $\mathbf{a}_1 = (0, a)$, $\mathbf{a}_2 = (-\sqrt{3}a/2, a/2)$, а a – параметр решетки СкК, см. рис 1. Статические свойства анзаца (3)–(4) подробно обсуждались нами ранее в работах [15, 14]. Было показано, что предложенная конфигурация СкК обладает меньшей энергией по сравнению с магнитной спиралью и однородной конфигурацией в диапазоне значений магнитного поля, $0.25 \lesssim b \lesssim 0.8$.

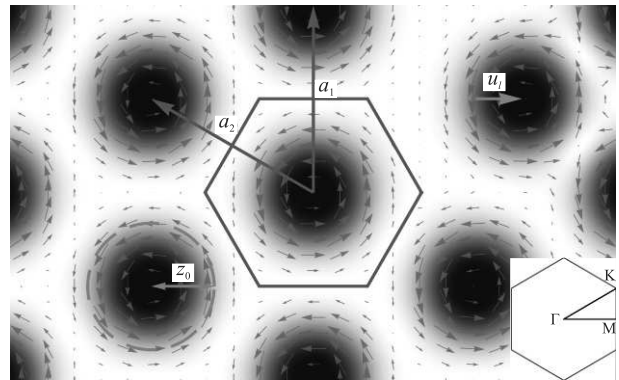


Рис. 1. (Цветной онлайн) Эскиз СкК с одним смещением из положения равновесия скирмионом. Красные стрелки и гексагон показывают вектора решетки и примитивную ячейку СкК, оранжевый круг иллюстрирует типичное значение параметра z_0 , зеленая стрелка обозначает смещение скирмиона в правом верхнем углу. Зона Бриллюэна и ее симметричные точки изображены в правом нижнем углу

Динамика вектора локальной намагниченности описывается плотностью лагранжиана, $\mathcal{L} = \mathcal{T} - \mathcal{E}$, со следующим кинетическим слагаемым:

$$\mathcal{T} = \frac{S}{\gamma_0} (1 - \cos \theta) \dot{\varphi}, \quad (5)$$

где φ и θ определяют направление вектора $\mathbf{n} = (\cos \varphi \sin \theta, \sin \varphi \sin \theta, \cos \theta)$, а γ_0 – гиромангнитное отношение. Можно убедиться, что такая форма кинетического слагаемого приводит к уравнению Ландау–Лифшица. В терминах f выражение (5) может быть записано следующим образом:

$$\mathcal{T}[f] = \frac{i}{2} \frac{\bar{f} \partial_t f - f \partial_t \bar{f}}{1 + f \bar{f}}, \quad (6)$$

здесь множитель S/γ_0 был включен в единицы измерения времени. Точное уравнение на $f(t)$ существенно нелинейное и не может быть решено в общем виде. В предыдущих работах [19, 20] мы обсуждали описание нормальных мод инфинитезимальных флуктуаций функции f . В этой работе мы сосредоточимся на построении подхода к описанию гиротропной моды СкК.

Поле смещений и дисперсия. В предыдущих работах мы рассматривали f_{SkX} , ур. (4), как равновесную конфигурацию локальной намагниченности f_0 , на фоне которой существуют небольшие динамические флуктуации, δf . Общая функция может быть записана следующим образом

$$f = f_0 + \delta f \equiv f_0 + (1 + f_0 \bar{f}_0) \psi,$$

динамика ψ подробно обсуждалась ранее в работе [19].

В настоящей работе мы полагаем, что решетка скирмионов несовершенна, в том смысле, что ее стереографический образ все еще описывается суммой отдельных скирмионов, и их форма остается оптимальной, при этом несовершенство проявляется в положении центров скирмионов. Подобное рассмотрение схоже с описанием смещений ионов в кристаллах в теории фононов.

$$f_{SkX} = \sum_l f_l(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l^{(0)} + \mathbf{u}_l), \quad (7)$$

где $\mathbf{r}_l^{(0)} = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2$, здесь n, m – целые, а $\mathbf{a}_{1,2}$ – векторы решетки. Для инфинитезимальных смещений $\mathbf{u}_l$ можно написать выражение:

$$f_{SkX} \simeq f_0 + \sum_l \mathbf{u}_l \nabla f_1(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l^{(0)}). \quad (8)$$

Чтобы использовать выражения, полученные ранее в работе [19], мы определим величину $\psi(\mathbf{r})$ следующим образом:

$$\sum_l \mathbf{u}_l \nabla f_1(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l^{(0)}) = (1 + f_0 \bar{f}_0) \psi(\mathbf{r}), \quad (9)$$

а также напомним $\mathbf{u}_j \nabla = u_j^+ \partial_z + u_j^- \partial_{\bar{z}}$, где $\partial_z = (\partial_x - i\partial_y)/2$, $\partial_{\bar{z}} = (\partial_x + i\partial_y)/2$, и $u_j^\pm = u_j^x \pm iu_j^y$. Используя для краткости обозначение $f_j = f_1(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j^{(0)})$, мы выразим

$$\psi = \sum_j \frac{u_j^+ \partial_z f_j + u_j^- \partial_{\bar{z}} f_j}{1 + f_0 \bar{f}_0}, \quad (10)$$

и аналогично для комплексно-сопряженной величины $\bar{\psi}$. В итоге мы получаем:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \psi \\ \bar{\psi} \end{pmatrix} &= \frac{1}{1 + f_0 \bar{f}_0} \sum_j \begin{pmatrix} \partial_z f_j & \partial_{\bar{z}} f_j \\ \partial_z \bar{f}_j & \partial_{\bar{z}} \bar{f}_j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_j^- \\ u_j^+ \end{pmatrix}, \\ &\equiv \sum_j \mathcal{O}_j \begin{pmatrix} u_j^- \\ u_j^+ \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (11)$$

Для однородного смещения $\mathbf{u}_j = \mathbf{u}$, используя свойство $\sum_j (f_j, \bar{f}_j) = (f_0, \bar{f}_0)$, мы восстанавливаем ранее полученное выражение для нулевой моды (см. ур. (29) в работе [19]):

$$\begin{aligned} \Psi_\emptyset &= \frac{1}{1 + f_0 \bar{f}_0} \begin{pmatrix} \partial_z f_0 \\ \partial_{\bar{z}} f_0 \end{pmatrix}, \\ \bar{\Psi}_\emptyset &= \sigma_1 \Psi_\emptyset^* = \frac{1}{1 + f_0 \bar{f}_0} \begin{pmatrix} \partial_z f_0 \\ \partial_{\bar{z}} f_0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (12)$$

Квадратичная по смещениям часть лагранжиана принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= \frac{1}{2} \sum_{lj} \begin{pmatrix} u_l^+ & u_l^- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -i\hat{\mathcal{K}}_{lj} \partial_t - \hat{\mathcal{H}}_{lj} \\ \hat{\mathcal{K}}_{lj} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_j^- \\ u_j^+ \end{pmatrix}, \\ \hat{\mathcal{K}}_{lj} &= \int d\mathbf{r} \mathcal{O}_l^\dagger \cdot \sigma_3 \cdot \mathcal{O}_j, \\ \hat{\mathcal{H}}_{lj} &= \int d\mathbf{r} \mathcal{O}_l^\dagger \cdot \begin{pmatrix} (-i\nabla + \mathbf{A})^2 + U & V \\ V^* & (i\nabla + \mathbf{A})^2 + U \end{pmatrix} \cdot \mathcal{O}_j, \end{aligned} \quad (13)$$

явный вид выражений для U , V и $\mathbf{A}$ приводится в работе [19]².

Обсудим несколько общих свойств возникающих выражений.

(i) В силу трансляционной инвариантности, величины $\hat{\mathcal{K}}_{lj}$ и $\hat{\mathcal{H}}_{lj}$ зависят лишь от разности $\mathbf{d} = \mathbf{r}_l^{(0)} - \mathbf{r}_j^{(0)}$.

(ii) Нулевая мода соответствует суммированию по j , следовательно, должно выполняться свойство $\sum_j \hat{\mathcal{H}}_{lj} = \sum_l \hat{\mathcal{H}}_{lj} = 0$, см. ниже.

²Пользуясь возможностью, исправим опечатку в работе [19]: слагаемое в фигурных скобках в определении $\mathbf{A}$ должно обладать другим знаком и множителем 2 вместо 4.

(iii) Стереографический образ отдельного скирмиона $f_1(\mathbf{r})$ быстро убывает с расстоянием. Следовательно, $\hat{K}_{lj}$, $\hat{H}_{lj}$ быстро убывают с ростом $|\mathbf{r}_l^{(0)} - \mathbf{r}_j^{(0)}|$. Поэтому целесообразно рассматривать самодействие, $l = j$, и взаимодействие ближайших соседей.

(iv) Можно показать, что $\sum_j \hat{K}_{lj} = \pi\sigma_z$, эта величина пропорциональна топологическому заряду, приходящемуся на элементарную ячейку СкК.

(v) Для треугольной решетки с шестью соседями имеем $\mathbf{d} = (a \cos \phi_d, a \sin \phi_d)$, где $\phi_d = \frac{\pi}{3}(n - 1/2)$ и $n = 0, \dots, 5$. Каждый отдельный скирмион характеризуется определенной хиральностью, $f_1(\mathbf{r}) \propto e^{i\phi}/r$. Благодаря этому потенциалы U, V , а как следствие и матрица $\mathcal{O}_j$, при вращении $\phi \rightarrow \phi + \phi_d$ меняются определенным образом; стоит отметить, что при таком повороте фаза ϕ_d удваивается у внедиагональных членов $\hat{H}_{lj}$, а у диагональных не меняется. Таким образом, мы получаем:

$$\hat{H}_{lj} = \begin{pmatrix} h_1 & h_2 e^{-2i\phi_d} \\ h_2 e^{2i\phi_d} & h_1 \end{pmatrix},$$

где $h_{1,2}$ зависят только от расстояния, d . На одном узле, $l = j$, внедиагональные члены отсутствуют, $h_2 = 0$. Численный расчет показывает, что $h_{1,2} < 0$ для $l \neq j$.

(vi) Уравнение Тиле для движения l' -го скирмиона можно получить, положив $u_j^\pm = 0$ в (13) для всех $j \neq l$. В этом случае лагранжиан принимает вид $\mathcal{K}_l u_l^x \dot{u}_l^y - h_1((u_l^x)^2 + (u_l^y)^2)$, ср. [26]. Отметим, что даже если изначально $u_j^\pm = 0$, то коллективный характер ур. (13) приводит к распространению изначального возмущения. Мы вернемся к этому вопросу ниже.

Пользуясь упомянутыми выше свойствами, получим квадратичную форму лагранжиана:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \begin{pmatrix} u_{-\mathbf{q}}^+ & u_{-\mathbf{q}}^- \end{pmatrix} \left(-i\hat{K}_{\mathbf{q}} \partial_t - \hat{H}_{\mathbf{q}} \right) \begin{pmatrix} u_{\mathbf{q}}^- \\ u_{\mathbf{q}}^+ \end{pmatrix},$$

$$\hat{K}_{\mathbf{q}} = (\pi + k_1 \gamma_s(\mathbf{q})) \sigma_z, \quad (14)$$

$$\hat{H}_{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} h_1 \gamma_s(\mathbf{q}) & h_2 \gamma_d^*(\mathbf{q}) \\ h_2 \gamma_d(\mathbf{q}) & h_1 \gamma_s(\mathbf{q}) \end{pmatrix},$$

где $u_j^x \pm i u_j^y = \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_j} u_{\mathbf{q}}^\pm$, а сумма по шести ближайшим соседям дает

$$\begin{aligned} \gamma_s(\mathbf{q}) &= \sum_{\mathbf{d}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{d}} - 6 = \\ &= 2 \left(2 \cos \frac{\sqrt{3}}{2} q_x a \cos \frac{1}{2} q_y a + \cos q_y a - 3 \right), \\ \gamma_d(\mathbf{q}) &= \sum_{\mathbf{d}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{d}} e^{2i\phi_d} = \\ &= 2 \left(\cos \frac{\sqrt{3}}{2} q_x a \cos \frac{1}{2} q_y a - \cos q_y a - \right. \\ &\quad \left. - i\sqrt{3} \sin \frac{\sqrt{3}}{2} q_x a \sin \frac{1}{2} q_y a \right), \end{aligned} \quad (15)$$

при этом $\gamma_{s,d}(0) = 0$. Обращение в нуль диагональных членов $\hat{H}_{\mathbf{q}}$ при $\mathbf{q} = 0$ обеспечивается свойством (ii), упомянутым выше, и мы обсудим его ниже.

Дисперсионный закон $\omega = \epsilon_{\mathbf{q}}$ во временной зависимости $u_{\mathbf{q}}^\pm(t) = e^{i\omega t} u_{\mathbf{q}}^\pm$ может быть получен решением уравнения $\det(\omega \hat{K}_{\mathbf{q}} - \hat{H}_{\mathbf{q}}) = 0$, из которого следует:

$$\epsilon_{\mathbf{q}} = \frac{(h_1^2 \gamma_s^2(\mathbf{q}) - h_2^2 |\gamma_d(\mathbf{q})|^2)^{1/2}}{\pi + k_1 \gamma_s(\mathbf{q})}.$$

Численно мы нашли, что во всем диапазоне значений, $b \in (0.3, 0.8)$, справедливо соотношение $h_1 \simeq 0.84 h_2$. Зависимость $h_{1,2}$ от b изображена на рис. 2. Стоит отметить, что оба коэффициента стремятся к

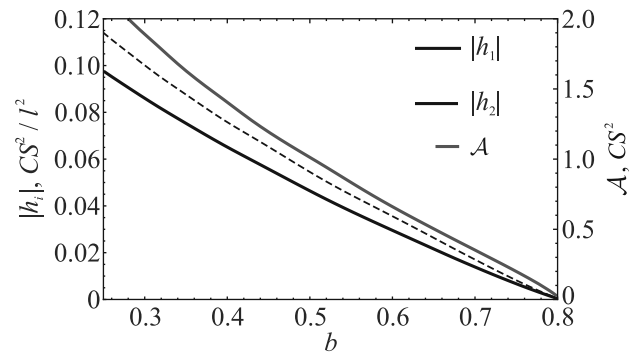


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость прыжковых констант h_1 , h_2 , и жесткости A от магнитного поля b

нулю одновременно при подходе к критическому полю, $b_c \simeq 0.8$. В рамках теории упругости это значит, что коэффициенты Ламе λ , μ , обсуждаемые в работе [22], убывают и обращаются в нуль при $b = b_c$, при этом $\lambda \simeq 1.94\mu$, см. также ур. (19) ниже. Зависимость дисперсии вдоль контура проходящего через симметричные точки зоны Бриллюэна показана на рис. 3. Выражение $\epsilon_{\mathbf{q}}$ принимает значения $9|h_1|/\pi$ и $2\sqrt{4h_1^2 - h_2^2}/\pi$ в симметричных точках $\mathbf{q} = K$ и $\mathbf{q} = M$, соответственно. Также $\epsilon_{\mathbf{q}=M}/\epsilon_{\mathbf{q}=K} \simeq 0.71$ во

всем диапазоне значений b . Уменьшение ширины зоны с сохранением упомянутого выше отношения 0.71, с ростом b согласуется с результатами, полученным в работе [18]. Величина k_1 в кинетическом члене $\hat{\mathcal{K}}_{\mathbf{q}}$ отрицательная и небольшая, $|k_1| < 2 \cdot 10^{-2}$, поэтому в дальнейшем мы опустим ее из рассмотрения.

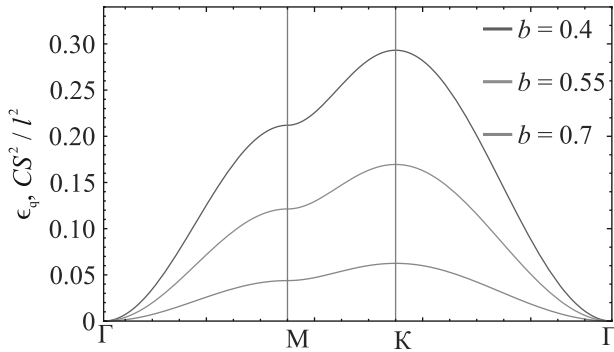


Рис. 3. (Цветной онлайн) Дисперсия $\epsilon_{\mathbf{q}}$ для разных значений b . Символы Γ , M , K соответствуют симметричным точкам зоны Бриллюэна, обозначены на рис. 1

В пределе малых волновых векторов $|q| \ll 1$, справедливо следующее:

$$\epsilon_{\mathbf{q}} \simeq \frac{3}{4\pi} q^2 a^2 \sqrt{4h_1^2 - h_2^2} \equiv \mathcal{A} q^2. \quad (16)$$

Зависимость коэффициента жесткости, $\mathcal{A}$, от b изображена на рис. 2; между величинами $\mathcal{A}$ и $h_{1,2}$ нет простой пропорциональной зависимости, поскольку параметр d нелинейно зависит от b , см. работу [19]. Имеет смысл сравнить величину $\mathcal{A}$ в контексте дисперсии магнонов в простом ферромагнетике. Этот случай соответствует конфигурации $f_0 \equiv 0$, а следовательно $U = b$, $V = 0$ и $\mathbf{A} = 0$ в (13), см. ур. (16)–(18) в [19]. Это приводит к тому, что $\epsilon_{\mathbf{q}} = q^2 + b$, т.е. к $\mathcal{A} = 1$, и щели в спектре. Сравнивая полученные выше выражения со случаем простого ферромагнетика, можно отметить, что дисперсия низлежащих возбуждений бесщелевая, а жесткость убывает с ростом поля. Может возникнуть вопрос: как с ростом поля b в бесщелевом спектре появляется щель при исчезновении СкК и переходе в фазу однородной намагниченности. Ответ состоит в том, что в этом случае область применения (16) сужается до $q = 0$, поскольку $a \rightarrow \infty$ при b_c , ср. [27].

Рассмотрим теперь подробнее упомянутое выше свойство (ii), использованное в определении $\gamma_s(\mathbf{q})$. Вычисления, выполненные с использованием нашей пробной функции, показывают, что свойство $\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{q}} = 0$ для $\mathbf{q} = 0$ выполнено с точностью до $5 \cdot 10^{-3}$ в диапазоне полей $0.35 < b < 0.75$. Это говорит о хорошем выборе пробной функции и согласуется с нашей

предыдущей работой [19]. В то же время, наша пробная функция не является точным решением модели и не обеспечивает экстремум действия, его первая вариация тождественно не равна нулю. В этом случае следует добавить дополнительные члены к эффективному гамильтониану, $\hat{\mathcal{H}}_{lj}$ в (13), как мы поясним ниже.

Рассмотрим разложение нашей функции до второго порядка по смещениям:

$$\delta f = (1 + f_0 \bar{f}_0)^{-1} \psi = \sum_l \left(u_l^\alpha \partial_\alpha f_1(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l^{(0)}) + \frac{1}{2} u_l^\alpha u_l^\beta \partial_\alpha \partial_\beta f_1(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l^{(0)}) \right). \quad (17)$$

Это выражение должно быть умножено на $\delta \mathcal{L} / \delta f$, которая теперь предполагается отличной от нуля. После интегрирования по $\mathbf{r}$ члены первого порядка пропорциональные $\propto u_l^\alpha$, приводят к возникновению силы, приложенной к l -му скирмиону в направлении от положения равновесия. Члены второго порядка в (17), будучи умножены на $\delta \mathcal{L} / \delta f$ и проинтегрированы по $\mathbf{r}$, добавляются к выражению (13).

Прежде всего заметим, что кинетическая часть $\delta \mathcal{L} / \delta f$, будучи симметричной по индексам α, β , сводится к членам, пропорциональным полной производной по времени, $\propto \frac{d}{dt} (u_l^\alpha)^2$, которые можно отбросить. Потенциальную часть лагранжиана проинтегрируем по частям, отбросив внеинтегральные слагаемые из-за быстрого убывания $f_1(\mathbf{r})$ с расстоянием. Оставшаяся часть, после определенных вычислений, преобразуется к следующему виду:

$$\mathcal{L}' = \frac{1}{2} \sum_{lj} \left(u_l^+, u_l^- \right) \hat{\mathcal{H}}_{lj} \begin{pmatrix} u_l^- \\ u_l^+ \end{pmatrix}, \quad (18)$$

это значит, что мы должны заменить $\hat{\mathcal{H}}_{lj}$ в (13) на $\tilde{\mathcal{H}}_{lj} = \hat{\mathcal{H}}_{lj} - \delta_{lj} \sum_m \hat{\mathcal{H}}_{lm}$. Ясно, что если условие $\sum_j \hat{\mathcal{H}}_{lj} = 0$ изначально не выполнялось из-за неточности пробной функции, то теперь оно восстанавливается для $\tilde{\mathcal{H}}_{lj}$, поскольку $\sum_j \tilde{\mathcal{H}}_{lj} = 0$. Используя симметрию выражения (17) по индексам α, β , можно также показать, что также выполнено $\sum_l \tilde{\mathcal{H}}_{lj} = 0$. Все вышесказанное обосновывает свойство (ii), а также объясняет вычитание 6 в определении $\gamma_s(\mathbf{q})$.

Функция Грина в пределе малых $\mathbf{q}$. Обсудим распространение смещений в СкК. Чтобы упростить обсуждение, рассмотрим две последовательных замены координат в лагранжиане. В первую очередь, при помощи матрицы $U = \begin{pmatrix} 1, & -i \\ 1, & i \end{pmatrix}$, вернемся к декартовым координатам $u_{\mathbf{q}}^\pm = u_{\mathbf{q}}^x \pm i u_{\mathbf{q}}^y$.

Во-вторых, перейдем к главным осям $\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{q}}$, а именно, параллельно и перпендикулярно вектору $\mathbf{q} = q(\cos \phi_q, \sin \phi_q)$, написав $(u_{\mathbf{q}}^x, u_{\mathbf{q}}^y) = (u_{\mathbf{q}}^{\parallel}, u_{\mathbf{q}}^{\perp}) \cdot U_1^{\dagger}$, где $U_1 = \begin{pmatrix} \cos \phi_q & -\sin \phi_q \\ \sin \phi_q & \cos \phi_q \end{pmatrix}$. В итоге мы приводим лагранжиан к следующему виду:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \begin{pmatrix} u_{-\mathbf{q}}^{\parallel} & u_{-\mathbf{q}}^{\perp} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -A_{\parallel} q^2 & -2\pi \partial_t \\ 2\pi \partial_t & -A_{\perp} q^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\mathbf{q}}^{\parallel} \\ u_{\mathbf{q}}^{\perp} \end{pmatrix},$$

$$A_{\parallel} = -\frac{3}{2}(2h_1 + h_2)a^2, \quad A_{\perp} = -\frac{3}{2}(2h_1 - h_2)a^2, \quad (19)$$

где $A_{\parallel}, A_{\perp} > 0$ – модули упругости, соответствующие продольной и поперечной моде для акустических фононов; справедливо также $A_{\parallel} A_{\perp} = 2\pi \mathcal{A}$. Иная форма кинетического слагаемого приводит, во-первых, к квадратичной дисперсии в нашем случае вместо линейной для случая акустических фононов. Во-вторых, в нашем случае величина $2\pi u_{-\mathbf{q}}^{\perp}$ становится канонически сопряженным импульсом для смещения $u_{\mathbf{q}}^{\parallel}$.

Согласно общим правилам [28, 19], проведем процедуру вторичного квантования нашей теории. Потребуем выполнения $[u_{\mathbf{q}}^{\parallel}, 2\pi u_{-\mathbf{q}}^{\perp}] = i\hbar$ (мы считаем $\hbar = 1$), тогда

$$u_{\mathbf{q}}^{\parallel} = \frac{1}{\sqrt{4\pi\kappa}} (c_{\mathbf{q}}^{\dagger} e^{i\epsilon_{\mathbf{q}} t} + c_{-\mathbf{q}} e^{-i\epsilon_{\mathbf{q}} t}),$$

$$u_{\mathbf{q}}^{\perp} = i \frac{\sqrt{\kappa}}{\sqrt{4\pi}} (c_{\mathbf{q}}^{\dagger} e^{i\epsilon_{\mathbf{q}} t} - c_{-\mathbf{q}} e^{-i\epsilon_{\mathbf{q}} t}), \quad (20)$$

где $\kappa = \sqrt{A_{\parallel}/A_{\perp}} \simeq 1.98$ – параметр асимметрии. В терминах операторов рождения (уничтожения), $c_{\mathbf{q}}^{\dagger}$ ($c_{\mathbf{q}}$), гамильтониан приобретает вид $\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\mathbf{q}} \epsilon_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{q}}^{\dagger} c_{\mathbf{q}}$.

Определим запаздывающую функцию Грина следующим образом:

$$G(t, \mathbf{q}) = -i\vartheta(t) \begin{pmatrix} [u_{-\mathbf{q}}^x(t), u_{\mathbf{q}}^x] & [u_{-\mathbf{q}}^x(t), u_{\mathbf{q}}^y] \\ [u_{-\mathbf{q}}^y(t), u_{\mathbf{q}}^x] & [u_{-\mathbf{q}}^y(t), u_{\mathbf{q}}^y] \end{pmatrix}, \quad (21)$$

с соответствующим Фурье преобразованием при $t > 0$:

$$G(t, \mathbf{r}) = -\frac{\sqrt{3}a^2}{4\pi} \times \int \frac{d^2 \mathbf{q}}{(2\pi)^2} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} U_1 \begin{pmatrix} \frac{1}{\kappa} \sin \epsilon_{\mathbf{q}} t & -\cos \epsilon_{\mathbf{q}} t \\ \cos \epsilon_{\mathbf{q}} t & \kappa \sin \epsilon_{\mathbf{q}} t \end{pmatrix} U_1^{\dagger}.$$

Простое вычисление (с эффективно ограниченной областью интегрирования $q \leq a^{-1}$ при помощи гауссова множителя $\exp(-q^2 a^2)$) приводит к выраже-

нию, справедливому на больших временах и расстояниях, $t\mathcal{A} \gg ra$, $r \gg a$:

$$G(t, \mathbf{r}) = \frac{\sqrt{3}a^2}{16\pi^2 t \mathcal{A}} \left[-\cos(r^2/4t\mathcal{A}) \frac{\kappa + \kappa^{-1}}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \right.$$

$$\left. + \sin(r^2/4t\mathcal{A}) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} + F(r^2/4t\mathcal{A}) \frac{\kappa - \kappa^{-1}}{2} \begin{pmatrix} \cos 2\phi & \sin 2\phi \\ \sin 2\phi & -\cos 2\phi \end{pmatrix} \right],$$

$$F(z) = \cos z - \sin z/z. \quad (22)$$

На малых расстояниях, $r \ll \sqrt{t\mathcal{A}}$, существенно первое слагаемое в $G(t, \mathbf{r})$, отвечающее изотропному распространению. На промежуточных расстояниях, $\sqrt{t\mathcal{A}} \ll r \ll t\mathcal{A}/a$, главную роль играет комбинация первого и третьего слагаемых, и проявляется анизотропия тензора $G(t, \mathbf{r})$, с главными осями в направлении, параллельном и перпендикулярном вектору $\mathbf{r}$ в плоскости. На больших расстояниях, $r \gg t\mathcal{A}/a$, функция $G(t, \mathbf{r})$ становится экспоненциально мала, что говорит о том, что возмущение еще не достигло точки $\mathbf{r}$. Стоит отметить, что осциллирующие множители зависят только от отношения r^2/t , а упомянутая выше анизотропия касается относительного веса корреляций u^x и u^y . Мы иллюстрируем это поведение на рис. 4, где изображены две главных компоненты $G_{\parallel}(t, \mathbf{r})$ и $G_{\perp}(t, \mathbf{r})$, для парных корреляторов $u^{\parallel}$ и $u^{\perp}$, соответственно.

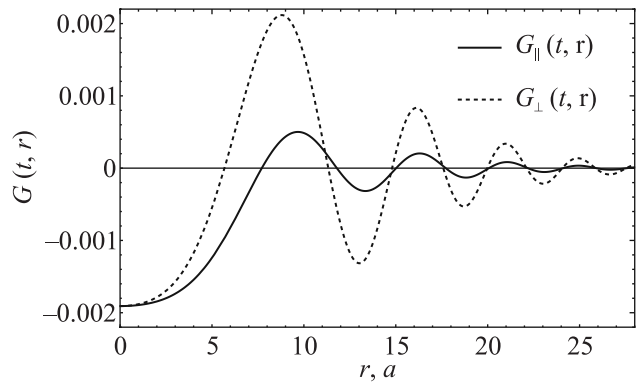


Рис. 4. Функции Грина $G_{\parallel}(t, \mathbf{r})$ и $G_{\perp}(t, \mathbf{r})$, при $t = 6\mathcal{A}^{-1}a^2$, описывают корреляции смещений $u^{\parallel}$ и $u^{\perp}$, параллельных и перпендикулярных вектору $\mathbf{r}$

Закключение. Мы построили теорию низколежащей голдстоуновской моды решетки скирмионов, также известной как гиротропная мода. Эта мода описывает смещение скирмионов из положений равновесия, соответствующее уравнение движения принимает вид коллективного уравнения Тиле. Спектр

квадратичен при малых волновых векторах, что является следствием двух фактов: упругий вид потенциальной энергии и кинетическое слагаемое лагранжиана, ассоциированное с фазой Берри. Упругий вид потенциальной энергии получен в результате рассмотрения скирмионов как отдельных топологических объектов и не предполагает сложного теоретического описания в терминах фазовых, трех магнитных спиралей и т.п. По этим причинам квадратичный характер спектра следует ожидать и при включении в модель других взаимодействий, например, дипольного взаимодействия, анизотропии и др., пока сохраняются структура СкК. Распространение возмущений по решетке скирмионов анизотропно на промежуточных расстояниях. Нами показано, что ширина зоны монотонно убывает с ростом магнитного поля и исчезает при критическом значении, отвечающем переходу в однородное ферромагнитное состояние.

Работа поддержана Российским научным фондом, грант # 22-22-20034 и Санкт-Петербургским научным фондом, грант # 33/2022. Работа В. Тимофеева частично поддержана Фондом развития теоретической физики и математики “БАЗИС”.

1. H. Vakili, J.-W. Xu, W. Zhou et al. (Collaboration), J. Appl. Phys. **130**, 070908 (2021).
2. Z. Yan, Y. Liu, Y. Guang, K. Yue, J. Feng, R. Lake, G. Yu, and X. Han, Phys. Rev. Appl. **44**, 392001 (2011).
3. N.S. Kiselev, A.N. Bogdanov, R. Schäfer, and U.K. Röfler, J. Phys. D: Appl. Phys. **44**, 392001 (2011).
4. F.H.D. Leeuw, R.V.D. Doel, and U. Enz, Rep. Prog. Phys. **138**, 255 (1994).
5. A.A. Thiele, Bell System Technical Journal **48**, 3287 (1969).
6. A. Bogdanov and A. Hubert, J. Magn. Magn. Mater. **138**, 255 (1994).
7. A.A. Thiele, Phys. Rev. Lett. **30**, 230 (1973).
8. M. Weisshofer, L. Rózsa, and U. Nowak, Phys. Rev. Lett. **127**, 047203 (2021).
9. A. Fert, N. Reyren, and V. Cros, Nat. Rev. Mater. **2**, 1 (2017).
10. S. Mühlbauer, B. Binz, F. Jonietz, C. Pfleiderer, A. Rosch, A. Neubauer, R. Georgii, and P. Böni, Science **323**, 915 (2009).
11. X.Z. Yu, N. Kanazawa, Y. Onose, K. Kimoto, W.Z. Zhang, S. Ishiwata, Y. Matsui, and Y. Tokura, Nat. Mater. **10**, 106 (2010).
12. X.Z. Yu, Y. Onose, N. Kanazawa, J.H. Park, J.H. Han, Y. Matsui, N. Nagaosa, and Y. Tokura, Nature **465**, 901 (2010).
13. N. Nagaosa and Y. Tokura, Nat. Nanotechnol. **8**, 899 (2013).
14. V.E. Timofeev, A.O. Sorokin, and D.N. Aristov, Phys. Rev. B **103**, 094402 (2021).
15. V.E. Timofeev, A.O. Sorokin, and D.N. Aristov, JETP Lett. **109**, 207 (2019).
16. A. Roldán-Molina, A.S. Nunez, and J. Fernández-Rossier, New J. Phys. **18**, 045015 (2016).
17. M. Garst, J. Waizner, and D. Grundler, J. Phys. D: Appl. Phys. **50**, 293002 (2017).
18. A. Mook, J. Klinovaja, and D. Loss, Physical Review Research **2**, 033491 (2020).
19. V.E. Timofeev and D.N. Aristov, Phys. Rev. B **105**, 024422 (2022).
20. V.E. Timofeev and D.N. Aristov, JETP Lett. **117**, 676 (2023).
21. Y. Onose, Y. Okamura, S. Seki, S. Ishiwata, and Y. Tokura, Phys. Rev. Lett. **109**, 037603 (2012).
22. O. Petrova and O. Tchernyshyov, Phys. Rev. B **84**, 214433 (2011).
23. N. Mohanta, A.D. Christianson, S. Okamoto, and E. Dagotto, Communications Physics **3**, 229 (2020).
24. T. Schwarze, J. Waizner, M. Garst, A. Bauer, I. Stasinopoulos, H. Berger, C. Pfleiderer, and D. Grundler, Nat. Mater. **14**, 478 (2015).
25. T. Weber, D.M. Fobes, J. Waizner, P. Steffens, G.S. Tucker, M. Böhm, L. Beddrich, C. Franz, H. Gabold, R. Bewley, D. Voneshen, M. Skoulatos, R. Georgii, G. Ehlers, A. Bauer, C. Pfleiderer, P. Böni, M. Janoschek, and M. Garst, Science **375**, 1025 (2022).
26. K.L. Metlov, Phys. Rev. B **88**, 014427 (2013).
27. D.N. Aristov and A. Luther, Phys. Rev. B **65**, 165412 (2002).
28. R. Rajaraman, *Solitons and instantons* North Holland, Amsterdam, N.Y., Oxford (1982).

Нелинейный оптический отклик возбужденной лафлиновской жидкости 1/3

Л. В. Кулик¹⁾, А. С. Журавлев, А. В. Ларионов, А. Б. Ваньков, А. А. Загитова, И. В. Кукушкин, В. Уманский

Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка, Россия

Поступила в редакцию 27 июля 2023 г.

После переработки 18 августа 2023 г.

Принята к публикации 18 августа 2023 г.

Экспериментально исследован ансамбль нейтральных возбуждений в лафлиновской жидкости в дробном состоянии 1/3. Обнаружено, что возбуждения вызывают нелинейный оптический отклик, проявляющийся в виде квадратичной зависимости сигнала отражения от мощности возбуждения. Приведенные экспериментальные результаты показывают, что наблюдаемый эффект обусловлен вкладом когерентного антистоксово-стоксова рассеяния света от возбужденной лафлиновской жидкости.

DOI: 10.31857/S123456782318012X, EDN: wxijgh

Двумерная электронная система позволяет исследовать квазичастицы с различной статистикой. В трех измерениях электронные комплексы могут быть либо фермионными, включающими сами электроны, дырки, трионы, плазмарионы и т. д., либо бозонными, включающими экситоны, плазмоны, биэкситоны, плекситоны и т. д. Напротив, в двумерной электронной системе, находящейся во внешнем магнитном поле, допускается дробная (энионная) статистика квазичастиц, являющаяся промежуточной между бозонным и фермионным пределами [1]. Возможность экспериментальной реализации энионной статистики в двумерных электронных системах была признана вскоре после пионерской работы Лафлина, описывающей свойства электронных систем для нескольких дробных квантово-холловских (ДКЭХ) состояний [2]. Однако лишь недавно было доказано, что определенные квазичастицы в двумерных электронных системах действительно являются энионами. Оказалось, что в состоянии ДКЭХ 1/3 поведение заряженных квазичастиц отличается от поведения частиц с бозонной или фермионной статистикой. Вместо этого они ведут себя как частицы со статистикой $\pi/3$ [3, 4]. Кроме того, в состояниях ДКЭХ ожидается более сложная статистика, в том числе и неабелевого вида [5].

Возникает вопрос, каковы нейтральные возбуждения в объеме такой энионной материи. Существует теоретический консенсус относительно магниторотонов – нейтральных возбуждений с орбитальным угловым моментом, равным единице [6, 7], – которые считаются бозонами. Тем не менее эксперименталь-

ная работа с магниторотонами представляет собой сложную задачу, поскольку они хорошо определены только при больших двумерных импульсах порядка обратной магнитной длины. При нулевом импульсе (в наиболее подходящем для экспериментального исследования случае) эти возбуждения попадают в многоротонный континуум и затухают [8, 9]. В то же время теоретический анализ предсказывает наличие другой низкоэнергетической бозонной ветви нейтральных возбуждений, существующей при нулевом импульсе, а именно, ветви “магнитогравитонов” [10–12].

Магнитогравитоны, пожалуй, – одни из самых экзотических квазичастиц в физике твердого тела. Традиционно их описывают в терминах возмущений пространственной метрики, введенных для системы квазичастиц ДКЭХ [10]. Эти возбуждения имеют орбитальный угловой момент, равный двум. Если бы их и удалось обнаружить экспериментально, они бы быстро релаксировали в основное состояние [13]. Тем не менее было обнаружено, что при определенных параметрах удерживающего потенциала двумерной системы аналоги магнитогравитонов с единичным спином (будем в дальнейшем называть их “спиновые магнитогравитоны”) могут быть нижайшими по энергии нейтральными возбуждениями с нулевым импульсом. Ранее авторам статьи удалось создать необходимые экспериментальные условия для наблюдения ансамбля спин-магнитогравитонов [14]. В настоящей работе мы исследуем оптические свойства возбужденной лафлиновской жидкости со спин-магнитогравитонами и наблюдаем новый эффект – нелинейный оптический отклик возбужденной лафлиновской жидкости.

¹⁾e-mail: kulik@issp.ac.ru

Для исследования ансамбля спин-магнитограви-
тонов была использована гетероструктура с кванто-
вой ямой GaAs/AlGaAs шириной 18 нм с concentra-
цией электронов $8.4 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$. Образец помещался в
криостат с откачкой паров ^3He для обеспечения ми-
нимальной температуры образца 0.5 K. Оптические
измерения проводились во внешнем магнитном поле
до 14 Тл с использованием двух экспериментальных
схем. В двухсветовой конфигурации (I) один све-
товод подводил излучение лазера накачки к образцу,
а другой использовался для сбора отраженного света
и направления его на входную щель спектрометра.
Во второй схеме (II) имелось оптическое окно, ис-
пользуемое как для подведения возбуждающего све-
та к образцу, так и для сбора рассеянного света. Рав-
номерно возбуждаемая область в первой экспери-
ментальной схеме имела диаметр 600 мкм, тогда как вто-
рая конфигурация позволяла сфокусировать пучок
лазера накачки в гораздо меньшее пятно диаметром
менее 100 мкм, но с неравномерным пространствен-
ным распределением. Использовалась спектроскопи-
ческая методика, основанная на резонансном отра-
жении света (RR, *resonant reflection*). Электронная
система возбуждалась с помощью перестраиваемого
непрерывного лазерного источника с шириной линии
10 МГц. Вклад отражения от поверхности образца
подавлялся с помощью скрещенных линейных поля-
ризаторов, установленных между образцом и торца-
ми накачивающего и собирающего световодов. Так-
же мы измерили спектры резонансной фотолюмине-
сценции (PL, *photoluminescence*) и фотовозбуждения
(PLE, *photoexcitation*) электронной системы (рис. 1).

В спектре фотовозбуждения исследуемой кванто-
вой ямы наблюдаются линии, соответствующие раз-
решенным двухчастичным оптическим переходам из
валентной зоны на нулевой уровень Ландау зоны
проводимости. Дырочные состояния в подзонах лег-
ких и тяжелых дырок валентной зоны в магнитном
поле представляют собой суперпозиции состояний на
0, 1, 2, 3 уровнях Ландау и с проекциями спина на
ось магнитного поля $-3/2$, $-1/2$, $1/2$ и $3/2$. Слия-
ние уровней Ландау конечной ширины приводит к
непрерывной области слабозапрещенных оптических
переходов с энергиями выше энергий разрешенных
оптических переходов с нулевого уровня Ландау тя-
желых дырок на нулевой уровень Ландау зоны про-
водимости (рис. 1). Следовательно, в спектрах ре-
зонансной фотолюминесценции значительную силу
осциллятора проявляют переходы между нулевыми
уровнями Ландау (0e-0h). Поскольку нижний спино-
вый подуровень нулевого уровня Ландау электронов
занят лафлиновской жидкостью, его интенсивность

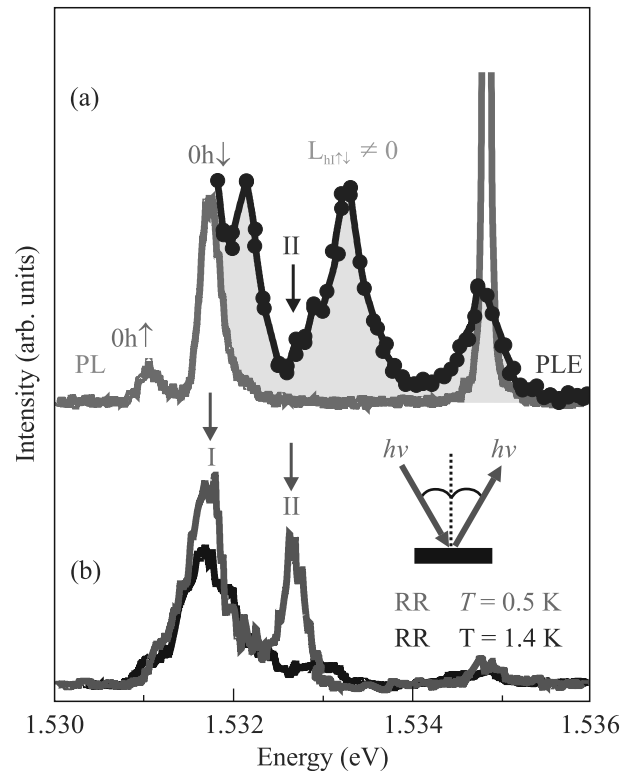


Рис. 1. (Цветной онлайн) (a) – Спектры фотовозбуждения (PLE) (синие точки) и резонансной фотолюминесценции (PL) (зеленая линия) лафлиновской жидкости, измеренные при температуре 0.5 K. Допустимые оптические переходы 0e-0h отмечены как 0h↑ и 0h↓ в зависимости от спина электрона в зоне проводимости GaAs (g -фактор электрона в GaAs отрицательный). Серым фоном отмечена область слабозапрещенных оптических переходов из валентной зоны в зону проводимости, из дырочных состояний с преимущественно ненулевым орбитальным угловым моментом. (b) – Спектр резонансного отражения (RR) лафлиновской жидкости при 0.5 K (красная линия) и электронной системы при 1.4 K при разрушении лафлиновской жидкости (черная линия). На вставке показана схема измерения сигнала RR

резонансной PL существенно меньше по сравнению с интенсивностью PL с верхнего спинового подуровня [14]. По той же причине в спектре RR электронной системы мы наблюдаем только одну хорошо различимую линию (I) с интенсивностью, значительно превышающей интенсивность остальных линий RR. Природа канала (I) отражения становится понятной из соответствующего спектра PL. Процесс можно представить как поглощение фотона из лазерного источника с созданием электрон-дырочной пары с дыркой на нулевом уровне Ландау подзоны тяжелых дырок валентной зоны и электроном на пустом верхнем спиновом подуровне нулевого уровня Лан-

дау зоны проводимости с последующей рекомбинацией фотовозбужденной электрон-дырочной пары.

Помимо основной линии I, в спектре RR лафлиновской жидкости наблюдается линия II заметной интенсивности, энергия которой не соответствует максимуму плотности состояний валентной зоны (рис. 1) [14]. Она связана с наличием в лафлиновской жидкости спин-магнитогравионов. Интенсивность линии II сильно меняется, когда дополнительное лазерное излучение с энергией, превышающей энергию оптического перехода ($0e-0h$), создает ансамбль сверхдолгоживущих спин-магнитогравионов.

Спин-магнитогравионы образуются в ходе релаксационных процессов (рис. 2). Электрон из валентной зоны квантовой ямы переносится на незанятый верхний спиновый подуровень нулевого уровня Ландау посредством слаборазрешенного оптического перехода. Фотовозбужденная дырка из валентной зоны релаксирует на верхний спиновый подуровень нулевого уровня Ландау тяжелых дырок за счет сильной спин-орбитальной связи в валентной зоне GaAs, вызывая изменение полного спина электронной системы. Затем при рекомбинации с электроном лафлиновской жидкости дырка из валентной зоны превращается в ферми-дырку, занимая место электрона на нижнем спиновом подуровне нулевого уровня Ландау зоны проводимости. В результате фотовозбужденный электрон и ферми-дырка могут образовать спин-магнитогравион при условии, что в процессе релаксации фотовозбужденной дырки в валентной зоне часть энергии релаксации, необходимая для возбуждения спин-магнитогравиона, передается электронам лафлиновской жидкости (рис. 2). В нашем исследовании мы обнаружили, что наибольшая скорость роста линии II на единицу мощности дополнительного лазерного излучения возникает, когда лазерное излучение имеет ту же энергию, что и оптический переход, связанный с линией II [14]. Поэтому именно в этом оптическом переходе наиболее эффективно образуются спин-магнитогравионы, тогда как наиболее эффективным каналом создания спин-магнитогравионов является передача всей энергии релаксации в валентной зоне на возбуждение электронов в лафлиновской жидкости. В этом случае для рассеивания избыточной энергии не требуется дополнительный акустический фотон (рис. 2). Этот процесс представляет собой резонансное стоксово комбинационное рассеяние света, создающее спин-магнитогравионы.

Однако само по себе стоксово комбинационное рассеяние не может привести к появлению линии в

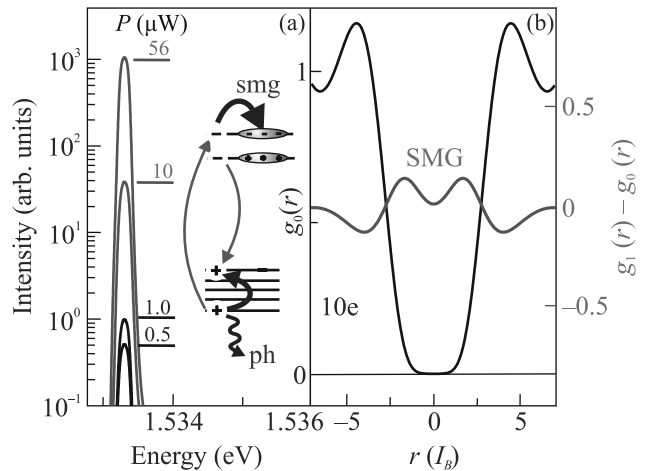


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Интенсивности резонансного отражения линии (II) при уровнях мощности лазерного возбуждения от 0.5 до 56 мкВт. На диаграмме изображены схемы оптических переходов, образующих спин-магнитогравионы (smg). (б) – Левая вертикальная ось – парная корреляционная функция $g(r)$ для основного состояния лафлиновской жидкости при факторе заполнения $1/3$ (черная кривая). Правая вертикальная ось – разность парных корреляционных функций для возбужденного и основного состояний, построенных для спин-магнитогравиона с нулевым импульсом (красная сплошная линия). Переменная r дана в единицах магнитной длины. Численный расчет проводился для 10 электронов по методике, описанной в [14]

спектре отражения. Для наблюдения линии II необходимо обратное антистоксово комбинационное рассеяние света от возбужденной лафлиновской жидкости. В этом случае не корректно рассматривать “фермиевскую дырку” в лафлиновской жидкости, которая могла бы быть заполнена валентным электроном при антистоксовом комбинационном рассеянии света, так как такого возбуждения не существует. Как показано на рис. 2, положительные и отрицательные заряды в спин-магнитогравионе “размазаны” в пространстве не менее чем на пять магнитных длин. Тем не менее возможен оптический переход из валентной зоны в зону проводимости с аннигиляцией спин-магнитогравиона как процесс, обратный стоксову комбинационному рассеянию. Таким образом, вклад в линию II могут вносить два процесса рассеяния: i) стоксово комбинационное рассеяние света, создающее спин-магнитогравион в основном состоянии лафлиновской жидкости, за которым следует антистоксово комбинационное рассеяние, аннигилирующее этот спин-магнитогравион (стоксово-антистоксово комбинационное рассеяние света); ii) антистоксово ком-

бинационное рассеяние света в возбужденном состоянии лафлиновской жидкости, аннигилирующее существующий спин-магнитограви́тон, а затем стоксово комбинационное рассеяние света с последующим рождением такого же спин-магнитограви́тона (антистоксово-стоксово комбинационное рассеяние света). Важно отметить, что оба процесса должны быть когерентными, чтобы давать вклад в резонансное отражение света с нулевой передачей энергии (импульса).

Интенсивность сигнала отражения линии II определяется не только двумя вышеупомянутыми процессами, но и “холостым” процессом – резонансным упругим обратным рассеянием от лафлиновской жидкости. Когерентное стоксово-антистоксово комбинационное рассеяние света невозможно отличить от фонового “холостого” процесса. Однако ожидается, что обратное антистоксово-стоксово комбинационное рассеяние света будет вызывать нелинейную зависимость сигнала RR от мощности возбуждающего излучения, когда один и тот же лазерный источник используется для двух процессов: возбуждения спин-магнитограви́тонов и измерения рассеяния света от существующих спин-магнитограви́тонов. Действительно, при использовании одиночного лазерного источника с энергией фотонов, равной энергии оптического перехода линии II, наблюдается сверхлинейное (квадратичное) усиление рассеяния в канале II при достижении определенного порога мощности лазерного возбуждения (рис. 2–4).

Нелинейность интенсивности сигнала отражения определяется двумя процессами: стоксовым (диаграмма (a) на рис. 4) и когерентным антистоксово-стоксовым рассеяниями (диаграмма (b) на рис. 4). Оптические процессы, рассматриваемые в (b) и в “холостом” процессе (c), могут быть описаны следующим уравнением:

$$I = \alpha P + \beta Pn, \quad (1)$$

где I – интенсивность отраженного света, P – мощность лазерного возбуждения, n – полное число спин-магнитограви́тонов в лафлиновской жидкости. Первое и второе слагаемые в сумме представляют собой соответствующие вклады от (c) и (b). Коэффициент α обозначает вероятность рассеяния света в (c). Он также учитывает способность нашей экспериментальной установки возбуждать электронную систему и собирать отраженный свет. Поэтому, поскольку точное значение α принципиально неизвестно, физический смысл имеет только нормированная величина $\frac{I}{\alpha}$.

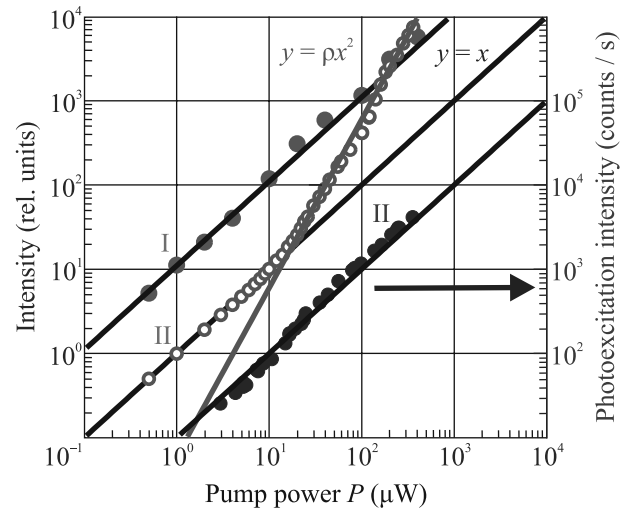


Рис. 3. (Цветной онлайн) Левая ось – зависимость интенсивности сигнала резонансного отражения от мощности лазерного возбуждения, полученная для каналов рассеяния I (красные сплошные точки) и II (красные пустые кружки). Интенсивность отраженного сигнала нормируется коэффициентом пропорциональности α из уравнения (1). Черные линии – линейные функции. Красная линия представляет собой квадратичную функцию мощности возбуждения. Правая ось – интенсивность сигнала фотовозбуждения, измеренная на энергии линии II

Вычисляя среднее число возбуждений, созданных в (a) в условиях стационарного возбуждения, получаем:

$$\frac{dn}{dt} = \gamma P - \frac{n}{\tau} = 0, \quad (2)$$

где τ – время жизни спин-магнитограви́тонов, а коэффициент γ обозначает вероятность возбуждения спин-магнитограви́тона с нулевым импульсом в процессе (a) с учетом всех неизвестных нашей экспериментальной установки. Таким образом, получаем:

$$\frac{I}{\alpha} = P + \frac{\beta\gamma\tau}{\alpha} P^2 = P + \rho P^2, \quad (3)$$

с $\rho = \frac{\beta\gamma\tau}{\alpha}$, что дает искомую зависимость P^2 .

Полученные уравнения хорошо описывают зависимость интенсивности сигнала рассеяния от мощности возбуждения. На начальном этапе, когда число спин-магнитограви́тонов в электронной системе невелико, в спектре отражения доминирует “холостой” процесс (c). При этом фотоны, возбуждающие электронную систему, участвуют в процессе (a), что приводит к созданию спин-магнитограви́тонов в лафлиновской жидкости. Дальнейшее увеличение мощности возбуждения активирует канал рас-

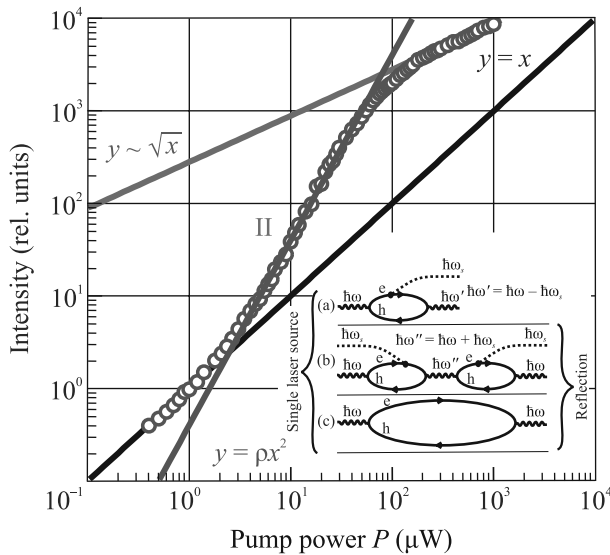


Рис. 4. (Цветной онлайн) Интенсивность сигнала резонансного отражения в канале II в зависимости от мощности лазерного возбуждения (пустые кружки), измеренная в небольшом пятне лазерного возбуждения, как описано в тексте. Интенсивность отраженного сигнала нормируется коэффициентом пропорциональности α из уравнения (1). Зеленая, черная и красная линии – корневая, линейная и квадратичная функции мощности возбуждения соответственно. На вставке приведена схема трех оптических процессов, стимулированных фотоном с энергией линии II: (a) – резонансное стоксово комбинационное рассеяние света; (b) – когерентное антистоксово-стоксово комбинационное рассеяние света; (c) – резонансное упругое обратное рассеяние света (“холостой” процесс)

сеяния (b), который определяется числом спин-магнитогравитонов в лафлиновской жидкости. В результате мы наблюдаем квадратичную зависимость сигнала отражения (рис. 3).

Чтобы исключить возможные альтернативные процессы, которые могут привести к нелинейному отклику в спектре отражения, рассмотрим известные механизмы нелинейности в многочастичных системах. Существуют два хорошо изученных эффекта, стимулирующих нелинейное рассеяние света, которые наиболее ярко выражены в атомарных конденсатах [15]. Бозонная статистика возбужденных состояний обуславливает усиление рассеяния света, а именно, когда в процессе рассеяния с созданием возбуждения участвует квантовое состояние, уже занятое аналогичными возбуждениями, рассеяние усиливается за счет бозе-фактора $N + 1$, где N – число возбуждений, занимающих это квантовое состояние. В этом случае нелинейность рассеяния света может наблюдаться и при поглощении света. Отсюда следует

ожидать, что зависимость интенсивности рассеянного света от мощности возбуждения будет более сложной, чем квадратичная зависимость. Однако в нашем исследовании отклонение от квадратичной зависимости в широком диапазоне мощностей возбуждения не наблюдается.

Мы независимо измерили интенсивность фотовозбуждения на энергии линии II в зависимости от мощности фотовозбуждения. В квантовых ямах AlGaAs/GaAs с высокой подвижностью ожидается, что зависимость интенсивности PLE от мощности возбуждения будет такой же, как и интенсивность поглощения, поскольку время безызлучательного затухания фотовозбужденных электронов много больше времени рекомбинации [16]. Установлено, что интенсивность PLE линейно зависит от мощности фотовозбуждения (рис. 3). Таким образом, наблюдаемый нелинейный оптический отклик возбужденной лафлиновской жидкости не связан с бозе-статистикой возбуждений. В то же время его нельзя объяснить макрозаполнением той или иной фотонной моды, участвующей в процессе рассеяния, поскольку используемый диапазон плотностей мощности непрерывного лазерного возбуждения слишком мал для регистрации такого эффекта [15].

Как только число спин-магнитогравитонов достигнет максимально допустимого значения (полное насыщение лафлиновской жидкости возбуждениями), мы должны увидеть насыщение процессов (a) и (b); т.е. дальнейшее увеличение мощности лазерного фотовозбуждения не должно приводить к сверхлинейному росту интенсивности сигнала RR. Действительно, при существенном уменьшении размера пятна лазерного возбуждения и, как следствие, увеличении плотности мощности возбуждения мы наблюдаем изменение поведения сигнала RR с квадратичной на сублинейную зависимость (рис. 4).

В заключение мы обнаружили квадратичную составляющую в зависимости сигнала отражения от возбужденной лафлиновской жидкости при факторе заполнения $1/3$. Экспериментальные результаты показывают, что этот вклад обусловлен когерентным антистоксово-стоксовым рассеянием света, индуцированным квазиравновесным ансамблем спин-магнитогравитонов, нейтральных возбуждений со спином единица. Аналогичный процесс рассеяния света должен наблюдаться и в других системах. Однако отношение сигналов когерентного антистоксово-стоксова рассеяния света и упругого обратного рассеяния света должно быть настолько малым, что отличить оптический сигнал первого процесса на фоне второго было бы сложно.

Нарушение симметрии по отношению к обращению времени в лафлиновской жидкости, сверхбольшие времена жизни спин-магнитогравитонов и резонансные условия, связанные со смешиванием уровней Ландау зон тяжелых и легких дырок в квантовых ямах GaAs/AlGaAs создают уникальную возможность прямого наблюдения этого интересного физического явления. В лафлиновской жидкости данный эффект позволяет измерить точную энергию спин-магнитогравитона при нулевом импульсе, которая до сих пор была установлена с точностью до g -фактора одночастичных электронов [14]. Энергия спинового магнитогравитона при нулевом импульсе равна 1.6 мэВ, что очень близко к численному значению (1.57 мэВ), полученному при компьютерном моделировании конечной электронной системы из 10 электронов. Кроме того, используя когерентное антистоксово-стоксово рассеяние света, экспериментально определена плотность полного насыщения лафлиновской жидкости спин-магнитогравитонами, что позволяет исследовать новое квазиравновесное состояние электронной материи – возбужденную лафлиновскую жидкость.

Авторы благодарны В. Д. Кулаковскому, М. М. Глазову и О. А. Григорьеву за полезные обсуждения. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект # 23-12-00011.

1. F. Wilczek, Phys. Rev. Lett. **49**, 957 (1982).
2. R. B. Laughlin, Phys. Rev. Lett. **50**, 1395 (1983).
3. H. Bartolomei, M. Kumar, R. Bisognin, A. Marguerite,

- J.-M. Berroir, E. Bocquillon, B. Placais, A. Cavanna, Q. Dong, U. Gennser, Y. Jin, and G. Féve, Science **368**, 173 (2020).
4. J. Nakamura, S. Liang, G. C. Gardner, and M. J. Manfra, Nature Phys. **16**, 931 (2020).
5. R. L. Willett, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, Proc. Natl. Acad. Sci. **106**, 8853 (2009).
6. S. M. Girvin, A. H. MacDonald, and P. M. Platzman, Phys. Rev. Lett. **54**, 581 (1985).
7. S. M. Girvin, A. H. MacDonald, and P. M. Platzman, Phys. Rev. B **33**, 2481 (1986).
8. I. V. Kukushkin, J. H. Smet, V. W. Scarola, V. Umansky, and K. von Klitzing, Science **324**, 1044 (2009).
9. M. Kang, A. Pinczuk, B. S. Dennis, M. A. Eriksson, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, Phys. Rev. Lett. **84**, 546 (2000).
10. F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **107**, 116801 (2011).
11. A. Gromov and D. T. Son, Phys. Rev. X **7**, 041032 (2017).
12. T. Can, M. Laskin, and P. Wiegmann, Phys. Rev. Lett. **113**, 046803 (2014).
13. P. Wiegmann, Phys. Rev. Lett. **120**, 086601 (2018).
14. L. V. Kulik, A. S. Zhuravlev, L. I. Musina, E. I. Belozarov, A. B. Van'kov, O. V. Volkov, A. A. Zagitova, I. V. Kukushkin, and V. Y. Umansky, Nat. Commun. **12**, 6477 (2021).
15. W. Ketterle and S. Inouye, C. R. Acad. Sci. Paris Série IV **2**, 339 (2001).
16. L. V. Kulik, A. I. Tartakovskii, A. V. Larionov, E. S. Borovitskaya, and V. D. Kulakovskii, ZhETF **112**, 353 (1997) [L. V. Kulik, A. I. Tartakovskii, A. V. Larionov, E. S. Borovitskaya, and V. D. Kulakovskii, JETP **85**, 195 (1997)].

Содержание

Том 118, выпуск 5

Оптика, лазерная физика

Мажукина К.А., Румянцев В.В., Дубинов А.А., Уточкин В.В., Разова А.А., Фадеев М.А., Спирин К.Е., Жолудев М.С., Михайлов Н.Н., Дворецкий С.А., Гавриленко В.И., Морозов С.В. Генерация длинноволнового стимулированного излучения в квантовых ямах HgCdTe с увеличенным энергетическим порогом оже-рекомбинации	311
--	-----

Ватник И.Д., Горбунов О.А., Чуркин Д.В. Поляризационная динамика узких спектральных мод волоконного ВКР-лазера со случайной распределенной обратной связью	317
--	-----

Конденсированное состояние

Замкова Н.Г., Жандун В.С., Овчинников С.Г. Магнитная структура и механизм спин-кроссовера в людовигите Co_3VO_5	323
---	-----

Вальков В.В., Злотников А.О., Гамов А. Взаимосвязь магнетизма и топологии в MnBi_2Te_4 ...	330
--	-----

Бибенин Н.Г. Спиновая диффузия и колебания намагниченности при высокочастотной спиновой инжекции	338
--	-----

Чмырь С.Н., Казаков А.С., Галеева А.В., Долженко Д.Е., Артамкин А.И., Иконников А.В., Михайлов Н.Н., Дворецкий С.А., Банников М.И., Рябова Л.И., Хохлов Д.Р. РТ-симметричная фотопроводимость, стимулированная микроволновым излучением, в гетероструктурах на основе топологической фазы $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$	341
---	-----

Шикин В. Экранирующие свойства чистой воды и ее разбавленных растворов	346
--	-----

Мацукатова А.Н., Трофимов А.Д., Емельянов А.В. Температурно-индуцированный переход между режимами резистивного переключения мемристивных кроссбар-структур на основе парилена	355
---	-----

Максимов А.А., Тартаковский И.И., Алиев З.С., Амирасланов И.Р., Абдуллаев Н.А., Зверев В.Н., Джахангирли З.А., Складнева И.Ю., Отроков М.М., Мамедов Н.Т., Чулков Е.В. Температурные исследования спектров комбинационного рассеяния света в магнитных топологических изоляторах MnBi_2Te_4 и MnSb_2Te_4	361
--	-----

Методы теоретической физики

Cojocari M., Merenkov A., Kovalev F., Shitov S., Basharin A. Meta-bolometer based on toroidal response	367
--	-----

Нелинейные явления

Розенбаум В.М., Шапочкина И.В., Трахтенберг Л.И. Туннельный механизм изменения направления движения пульсирующего рэтчета. Влияние температуры	369
--	-----

Квантовая информатика

Ниязов Р.А., Аристов Д.Н., Качоровский В.Ю. Эффективный гамильтониан топологически защищенного кубита в геликоидальном кристалле	376
---	------------

Содержание
Том 118, выпуск 6
Поля, частицы, ядра

Ачасов Н.Н., Шестаков Г.Н. Оценки абсолютных долей распадов $f_0(1710)$ и радиационных переходов $\psi(2S) \rightarrow \gamma f_0(1710)$ и $\Upsilon(1S) \rightarrow \gamma f_0(1710)$ 387

Филатов Ю.Н., Кондратенко А.М., Николаев Н.Н., Сеничев Ю.В., Кондратенко М.А., Виноградов С.В., Цыплаков Е.Д., Бутенко А.В., Костромин С.А., Ладыгин В.П., Сыресин Е.М., Гурылева И.Л., Мельников А.А., Аксентьев А.Е. Система спин-флипа протонов на базе корректирующих диполей Нуклотрона/ОИЯИ на спиновом резонансе $\gamma G = 7$ 389

Оптика, лазерная физика

Кузнецов К.А., Кузнецов П.И., Фролов А.Д., Коновалов А.М., Ковалева П.М., Китаева Г.Х. Генерация третьей гармоники терагерцового излучения в топологических изоляторах на основе халькогенидов висмута и сурьмы 397

Шубин Н.М., Капаев В.В., Горбачевич А.А. Парные связанные состояния в континууме в волноводах с резонатором Фабри–Перо 403

Сазонов С.В., Устинов Н.В. Новый солитоноподобный режим генерации широкополосного терагерцового излучения лазерными импульсами с наклонными волновыми фронтами 410

Трибельский М.И. Влияние закона сохранения энергии, размерности пространства и симметрии задачи на сингулярности поля вектора Пойнтинга 417

Плазма, гидро- и газодинамика

Тумачев Д.Д., Филатов С.В., Вергелес С.С., Левченко А.А. Два режима динамики когерентных столбовых вихрей во вращающейся жидкости 430

Конденсированное состояние

Ханин Ю.Н., Вдовин Е.Е., Морозов С.В., Новоселов К.С. Корреляционная кулоновская щель при магнитотуннелировании между слоями графена 438

Муравьев В.М., Зарезин А.М., Гусихин П.А., Кукушкин И.В. В каком магнитном поле рождается краевой магнитоплазмон? 445

Магадеев Е.Б., Вахитов Р.М. Невзаимность проявления флексомагнитоэлектрического эффекта относительно знака воздействующих зарядов 449

Тимофеев В.Е., Аристов Д.Н. Голдстоуновская мода скирмионного кристалла 455

Кулик Л.В., Журавлев А.С., Ларионов А.В., Ваньков А.Б., Загитова А.А., Кукушкин И.В., Уманский В. Нелинейный оптический отклик возбужденной лафлиновской жидкости $1/3$ 462