

Том 117, Выпуск 9–10

ISSN 0370-274X

Май 2023



*Письма*  
*в*  
**ЖУРНАЛ**  
**ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ**  
*и*  
**ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ**  
**ФИЗИКИ**

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

2023 г. Том 117 вып. 9, стр. 637 – 716

2023 г. Том 117 вып. 10, стр. 717 – 800



РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

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

**том 117**

Выпуск 9

10 мая 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>**

---

© Российская академия наук, 2023

© Редколлегия журнала “Письма в ЖЭТФ” (составитель), 2023



## Формирование пучка частиц высокой энергии с помощью фокусирующих кристаллических устройств

Г. И. Бритвич, М. Ю. Костин, В. И. Питалев, И. В. Полуэктов, Ю. Е. Сандомирский, М. Ю. Чесноков<sup>1)</sup>,  
Ю. А. Чесноков, А. А. Янович

Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт” –  
Институт физики высоких энергий, 142281 Протвино, Россия

Поступила в редакцию 20 марта 2023 г.

После переработки 20 марта 2023 г.

Принята к публикации 29 марта 2023 г.

В тэвной области энергий управлять траекториями частиц с помощью электромагнитов для получения выведенных пучков на ускорителях становится сложно и очень затратно. Для этих целей больше подходят высокоградиентные устройства на основе изогнутых кристаллов. Эти кристаллы могут работать как сверхсильные линзы с фокусным расстоянием менее 1 м, с эквивалентным магнитным полем 1000 Тл. В данной работе реализована схема формирования расходящегося пучка с энергией 50 ГэВ двумя последовательно расположенными фокусирующими кристаллами для создания аксиально-симметричного пучка с малой расходимостью 30 мкрад как в горизонтальной, так и вертикальной плоскостях. Одно из перспективных применений такой схемы – создание пучков нейтрино высоких энергий.

DOI: 10.31857/S123456782309001X, EDN: bnljrv

Современные крупные ускорители уходят по энергии в тэвную область, БАК (Большой адронный коллайдер, ЛНС) уже оперирует на 7 ТэВ. Планируется БКК (Будущий кольцевой коллайдер, FCC) с энергией до 50 ТэВ. В России также имеется проект ускорителя в тэвной области энергии – Ускорительно накопительный комплекс (УНК) на энергию 3 ТэВ.

В этой области энергий управлять траекториями частиц с помощью электромагнитов для получения выведенных пучков становится сложно и очень затратно. Для этих целей больше подходят высокоградиентные устройства на основе изогнутых кристаллов [1]. Эти кристаллы могут работать как сверхсильные линзы с фокусным расстоянием менее 1 м, с эквивалентным магнитным полем 1000 Тл. В данной работе реализована схема формирования расходящегося пучка с энергией 50 ГэВ двумя последовательно расположенными фокусирующими кристаллами для создания аксиально-симметричного пучка с малой расходимостью  $\theta_c = 30$  мкрад как в горизонтальной, так и вертикальной плоскостях. ( $\theta_c = (2U_c/pv)^{1/2}$  – критический угол каналирования, или угол Линдхарда, где  $U_c \sim 20$  эВ – величина потенциального барьера плоскостного канала (111) в кремнии,  $p$ ,  $v$  – импульс и скорость налетающей частицы, см. [1]). Одно из перспективных применений такой схемы – создание пучков нейтрино высоких энергий.

Изогнутые кристаллы используются на ускорителях для вывода или коллимации протонных пучков [2–9]. В [10–14] показано, что с помощью изогнутого кристалла с фокусирующим торцом можно одновременно отклонять и фокусировать пучки частиц высоких энергий. Несколько экспериментов показали, что эффективность отклонения пучка частиц фокусирующим кристаллом может достигать десятков процентов [15, 16]. Недавно в работе ЦЕРН [17] показано, что два последовательно расположенных кристалла с прямоугольными торцами могут использоваться для эффективного управления протонным пучком на ускорителе. Кристаллы же с фокусирующей кромкой могут формировать пучки вторичных частиц, вылетающих из мишеней со значительной угловой расходимостью.

Для реализации схемы формирования расходящегося пучка двумя последовательно расположенными фокусирующими кристаллами на У-70 было изготовлено 2 экземпляра кристаллических устройств с фокусным расстоянием 1.7 и 2 м на основе пластин трапецидальной формы со скошенным торцом (рис. 1).

В этой оригинальной конструкции кристаллическая пластина трапецидальной формы, вырезанная из кремния вдоль кристаллографической плоскости (111), имеет размеры: 2 мм по ширине  $X$ , 70 мм по высоте  $Y$ , и длину вдоль пучка по координате  $Z$  от 20 до 40 мм, благодаря скошенному торцу. Металличе-

<sup>1)</sup>e-mail: chesnokov@ihep.ru

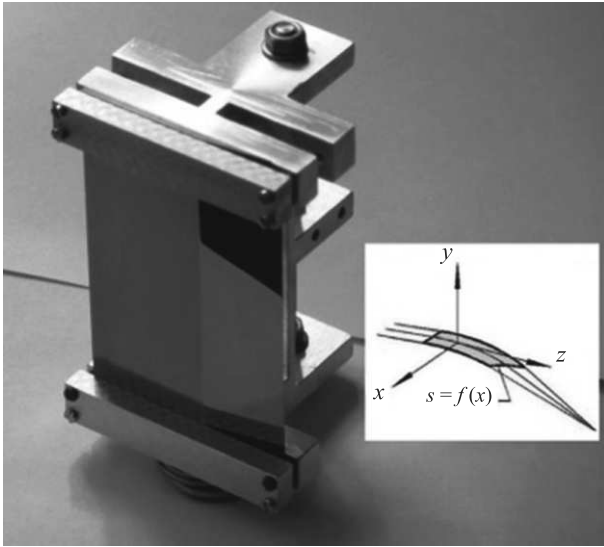


Рис. 1. (Цветной онлайн) Внешний вид фокусирующего кристаллического устройства и схема фокусировки пучка из параллельного в точку с помощью такого монокристалла, показанная на вставке рисунка

ский кристаллодержатель создает продольный изгибающий момент по координате  $Y$ . Благодаря анизотропным свойствам кристаллической решетки (см., например, [1, с. 85]) возникает поперечный изгиб кристалла с радиусом несколько метров, который и используется для фокусировки и последующего отклонения частиц. Особенности конструкции (большая высота кристалла), как это видно из рис. 1, позволяют снизить фоновые условия, так как вещество металлического держателя не попадает в пучок, облучается лишь сам кристалл, имеющий длину лишь 6% от длины ядерного взаимодействия. По сравнению с прежними образцами кристаллических линз, эти отличаются еще и более прецизионными методами обработки поверхности.

Сначала на установке КРИСТАЛЛ, расположенной на выведенном пучке У-70, эти кристаллы были протестированы в режиме фокусировки из параллельного пучка в точку (см. рис. 2), где были измерены фокусные расстояния и проверено качество фокусировки. Режим каналирования находился с помощью сцинтилляционных телескопов, а огибающая пучка в результате фокусировки определялась с помощью слоев эмульсионной пленки, как это делалось ранее в [12].

Заметим, что в экспериментах ЦЕРН [18–20] было выяснено, что в режиме каналирования при высоких энергиях многократное рассеяние частиц уменьшается в 8 раз. Столь слабое кулоновское рассеяние в режиме каналирования означает, что вертикально

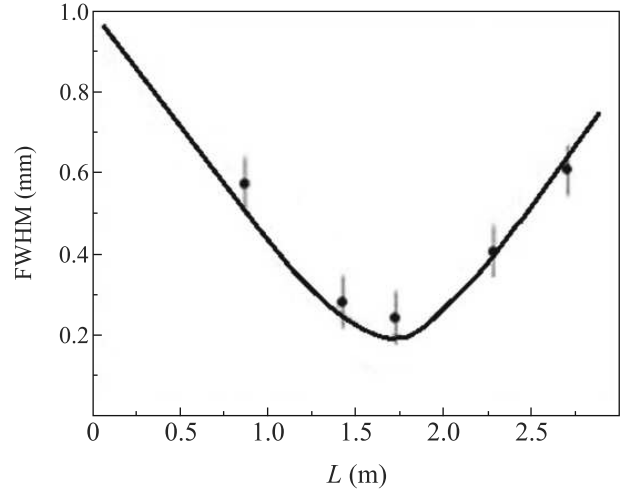


Рис. 2. Огибающая пучка (размер пучка в зависимости от расстояния, отсчитываемого от кристалла). Точки – эксперимент. Кривая – расчет для реальных условий с учетом рассеяния на воздухе и эмульсиях

и горизонтально фокусирующие кристаллы, расположенные последовательно, не будут мешать друг другу. Это позволяет создавать системы формирования пучка из нескольких последовательно расположенных кристаллов, например, создавать аксиально симметричные пучки пионов и каонов для генерации нейтрино по новой схеме.

На канале 4а У-70 проведен эксперимент по проверке кристаллооптической системы, составленной из этих кристаллов, а именно, двухкристалльная схема, позволяющая получить аксиально-симметричный пучок с малой угловой расходимостью для генерации нейтрино (рис. 3).

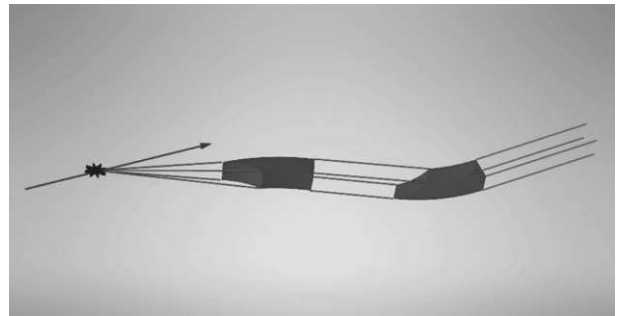


Рис. 3. (Цветной онлайн) Двухкристалльная оптическая схема для формирования аксиально-симметричного пучка

Существующая установка КРИСТАЛЛ для этих тестов была дополнена вторым гониометром для вертикально-отклоняющего кристалла (рис. 4).

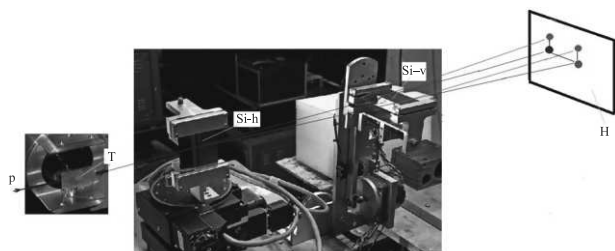


Рис. 4. (Цветной онлайн) Конфигурация установки КРИСТАЛЛ с активной мишенью и двумя фокусирующими кристаллами: Т – активная мишень; Si-h – горизонтально фокусирующий кристалл в гониометре; Si-v – вертикально фокусирующий кристалл в гониометре; Н – сцинтилляционный годоскоп. Лучи разных цветов показывают отклонение пучка кристаллами, пояснения представлены на рис. 6а

Для создания точечного источника расходящегося пучка протонов с энергией 50 ГэВ была установлена активная мишень Т в виде тонкой пластины (толщиной 150 мкм) из тяжелого сцинтиллятора CsI. На мишень попадала лишь малая доля пучка интенсивностью  $2 \times 10^3$  частиц/с. Пучок протонов в мишени был распушен до необходимой величины угловой расходимости  $\sigma_x = \sigma_y = 0.9$  мрад. Кристаллы вводились в режим каналирования поочередно, по схеме, представленной на рис. 5, как это делалось в [15].

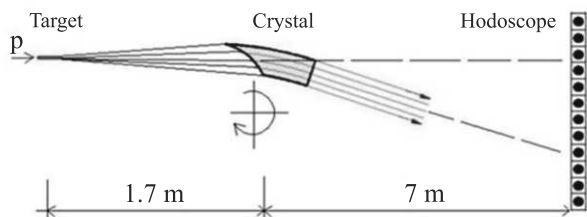


Рис. 5. (Цветной онлайн) Схема нахождения режима каналирования в кристалле, расположенном в гониометре

Эффект фокусировки и последующего отклонения расходящегося пучка фиксировался сцинтилляционным годоскопом (с шагом 1.6 мм), включенным на совпадения со сцинтиллятором тонкой мишени, согласно методу, примененному в [15].

По аналогичной схеме был настроен на режим каналирования вертикально-отклоняющий кристалл. После этого кристаллы вводились в пучок одновременно.

На рисунке 6 показаны первые результаты по эффективности отклонения расходящегося с мишени

пучка после прохождения в режиме каналирования через два кристалла.

Каждый из кристаллов фокусировал и отклонял пучок с ожидаемой эффективностью около 10%. Относительно невысокая эффективность двойного каналирования (около 1.4%) объясняется сравнительно низкой энергией протонов 50 ГэВ, где длина деканалирования составляет  $\sim 2$  см. Эффективность кристаллической системы резко возрастает для тэвных энергий, где длина деканалирования свыше 50 см (согласно измеренным величинам [21]).

Применение такой схемы с внутренней мишенью и двумя кристаллами позволит реализовать на крупных ускорителях новый метод формирования пучков нейтрино, который отличается существенной простотой, по сравнению с применяемыми схемами сейчас, которые требуют вывода протонного пучка, его взаимодействие с внешней мишенью и фокусировку пионов и каонов, родителей нейтрино, специальными высокоточными электромагнитными устройствами – горнами [22]. Такая громоздкая схема позволяет получить пучок нейтрино только в одном заданном направлении, в то время как кристаллы легко могут быть установлены в произвольных точках ускорителя, например, для зондирования Земли с помощью высокоэнергетичных нейтрино. Количественная информация о спектрах и потоках нейтрино подробно представлена ранее в работе [23].

В работе мы представили новые применения изогнутых кристаллов в ускорительной науке, которые, мы надеемся, могут стимулировать новые эксперименты по физике высоких энергий.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект # 23-22-00001).

1. V. M. Biryukov, Yu. A. Chesnokov, and V. I. Kotov, *Crystal channeling and its application at high-energy accelerators*, Springer, Berlin, Germany (1997), 219 p.
2. E. N. Tsyganov, *Estimates of cooling and bending processes for charged particle penetration through a mono crystal*, preprint TM-682, TM-684, Fermilab, Batavia (1976).
3. A. F. Elishev, N. A. Filatova, V. M. Golovatyuk et al. (Collaboration), *Phys. Lett. B* **88**, 387 (1979).
4. A. F. Elishev, N. A. Filatova, V. M. Golovatyuk et al. (Collaboration), *JETP Lett.* **30**, 442 (1979).
5. A. G. Afonin, V. T. Baranov, V. M. Biryukov et al. (Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **87**, 094802 (2001).
6. R. P. Fliller, A. Drees, D. Gassner, L. Hammons, G. McIntyre, S. Peggs, D. Trbojevic, V. Biryukov,

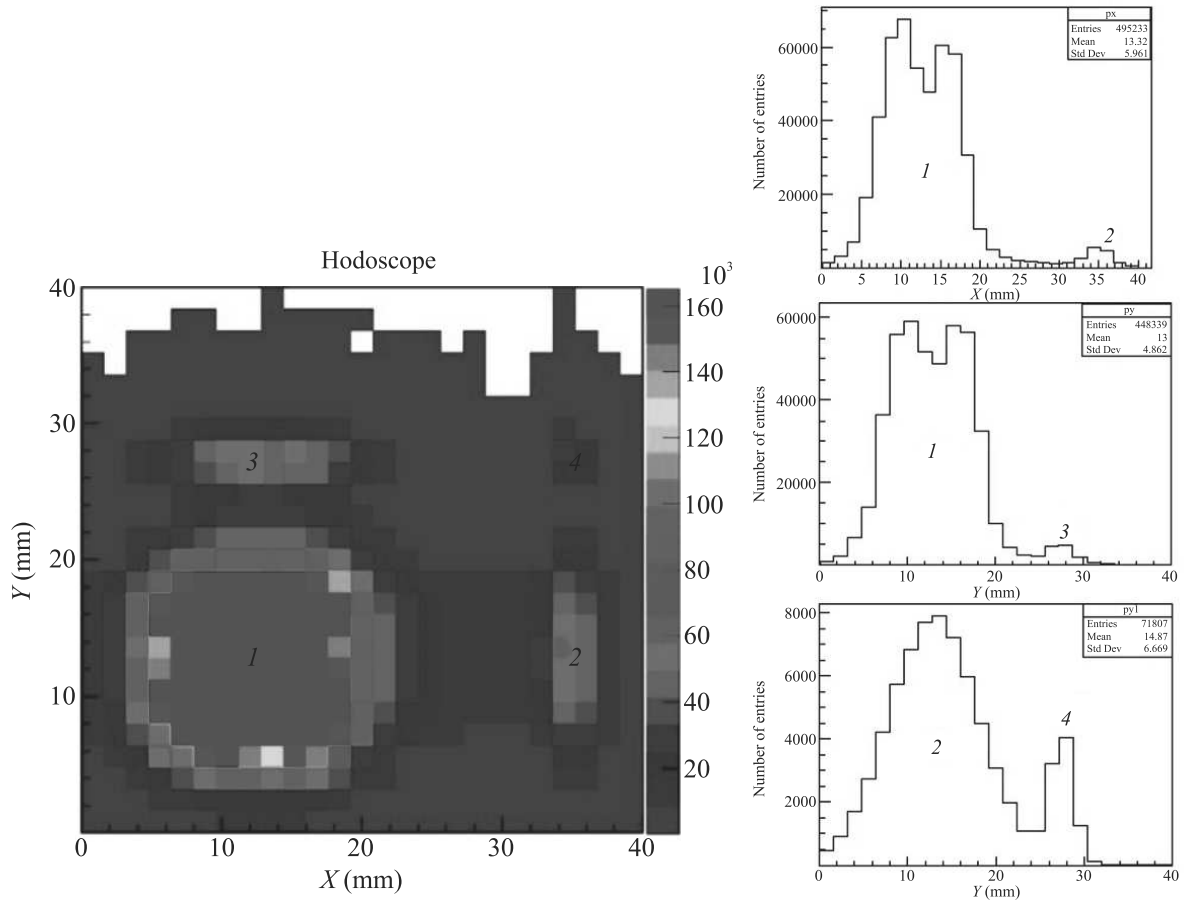


Рис. 6. (Цветной онлайн) (а) – Двумерное изображение профилей пучка: 1 – неотклоненный пучок протонов 50 ГэВ; 2 – отклоненный по горизонтали пучок первым кристаллом за счет каналирования; 3 – отклоненный по вертикали пучок вторым кристаллом, но не захваченный первым кристаллом в каналирование; 4 – аксиально симметричный пучок с малой расходимостью (угол Линдхарда, 30 мкрад), прошедший через два кристалла в режиме каналирования. (б) – Соответствующие одномерные проекции профилей пучка

- Y. Chesnokov, and V. Terekhov, Nucl. Instrum. Methods B **234**, 47 (2005).
7. N.V. Mokhov, G.E. Annala, A. Apyan et al. (Collaboration), Int. J. Mod. Phys. A **25**, 98 (2010).
  8. W. Scandale, G. Arduini, M. Butcher et al. (Collaboration), Phys. Lett. B **758**, 129 (2016).
  9. W. Scandale, G. Arduini, R. Assmann et al. (Collaboration), Int. J. Mod. Phys. A **37**, 2230004 (2022).
  10. M.A. Gordeeva, M.P. Gur'ev, A.S. Denisov et al. (Collaboration), JETP Lett. **54**, 487 (1991).
  11. V.I. Baranov, V.M. Biryukov, A.P. Bugarsky, Yu.A. Chesnokov, V.I. Kotov, M.V. Tarakanov, V.I. Terekhov, S.V. Tsarik, O.L. Fedin, M.A. Gordeeva, M.P. Gur'ev, Yu.P. Platonov, and A.I. Smirnov, Nucl. Instrum. Methods B **95**, 449 (1995).
  12. A.G. Afonin, V.I. Baranov, V.T. Baranov et al. (Collaboration), JETP Lett. **96**, 424 (2012).
  13. W. Scandale, G. Arduini, M. Butcher et al. (Collaboration), Phys. Lett. B **733**, 366 (2014).
  14. A.G. Afonin, A.G. Vasilyeva, A.A. Durum, M.Yu. Kostin, V.A. Maisheev, Yu.E. Sandomirsky, V.I. Pitalev, I.V. Poluektov, M.Yu. Chesnokov, Yu.A. Chesnokov, and A.A. Yanovich, Physics of Particles and Nuclei Letters **19**(4), 389 (2022).
  15. A.G. Afonin, G.I. Britvich, A.P. Bugorskii, M.K. Bulgakov, A.A. Durum, M.Yu. Kostin, A.V. Lutchev, V.A. Maisheev, Yu.E. Sandomirskiy, V.I. Pitalev, I.V. Poluektov, Yu.A. Chesnokov, P.N. Chirkov, and A.A. Yanovich, JETP Lett. **104**, 12 (2016).
  16. W. Scandale, G. Arduini, F. Cerutti et al. (Collaboration), Nucl. Instrum. Meth. B **446**, 15 (2019).
  17. W. Scandale, G. Arduini, F. Cerutti et al. (Collaboration), Nucl. Instrum. Methods A **1015**, 165747 (2021).

18. W. Scandale, L.S. Esposito, M. Garattini et al. (Collaboration), The European Physical Journal C **79**(12), 993 (2019).
19. W. Scandale, G. Arduini, F. Cerutti et al. (Collaboration), Phys. Lett. B **804**(10), 135396 (2020).
20. W. Scandale, G. Arduini, F. Cerutti et al. (Collaboration), The European Physical Journal Plus **137**(7), 811 (2022).
21. W. Scandale, G. Arduini, F. Cerutti et al. (Collaboration), Nucl. Instrum. Methods B **438**, 38 (2019).
22. В.П. Каргашев, В.И. Котов, *Методы формирования пучков частиц на ускорителях высоких энергий*, Энергоатомиздат, М. (1989).
23. Y. A. Chesnokov and V. A. Maishev, Nucl. Phys. A **1003**, 122012 (2020).



# Изучение уравнения состояния вращающейся глюонной плазмы с помощью решеточного моделирования

В. В. Брагута<sup>+1)</sup>, И. Е. Кудров<sup>\*×1)</sup>, А. А. Роечко<sup>+°1)</sup>, Д. А. Сычев<sup>+\*1)</sup>, М. Н. Чернодуб<sup>∇1)</sup>

<sup>+</sup>Лаборатория теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова,  
Объединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Россия

<sup>\*</sup>Московский физико-технический институт, 141700 Долгопрудный, Россия

<sup>×</sup>Институт физики высоких энергий им. А. А. Логунова,  
Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, 142281 Протвино, Россия

<sup>°</sup>Государственный университет “Дубна”, 141980 Дубна, Россия

<sup>∇</sup>Institut Denis Poisson UMR 7013, Université de Tours, 37200 Tours, France

Поступила в редакцию 20 марта 2023 г.

После переработки 26 марта 2023 г.

Принята к публикации 26 марта 2023 г.

В этой работе проведено изучение влияния вращения с постоянной угловой скоростью на уравнение состояния глюодинамики методами решеточного моделирования. Для этого мы переходим в систему отсчета, которая вращается вместе с исследуемой системой, где вращение сводится к появлению внешнего гравитационного поля. При достаточно медленном вращении свободная энергия исследуемой системы может быть разложена в ряд по угловой скорости. Методами решеточного моделирования мы вычисляем связанный с моментом инерции квадратичный коэффициент этого разложения, определяем его зависимость от температуры и размеров исследуемой системы. Наши результаты указывают, что момент инерции глюодинамики отрицателен вплоть до температуры  $T^* \sim 1.5T_c$ , а при температурах  $T > T^*$  момент инерции становится положительным, где  $T_c$  – критическая температура фазового перехода конфайнмент/деконфайнмент. Мы считаем, что отрицательный момент инерции означает термодинамическую нестабильность глюонной плазмы по отношению к вращению с постоянной угловой скоростью.

DOI: 10.31857/S1234567823090021, EDN: bobjib

**Введение.** Эксперименты по соударению тяжелых ионов позволяют исследовать влияние экстремальных условий на свойства сильно взаимодействующей кварк-глюонной плазмы (КГП). К таким условиям можно отнести высокую температуру, сильные электромагнитные поля, значительную барионную плотность и др. Среди экстремальных условий, воздействию которых подвергается КГП, особый интерес представляет быстрое вращение. Экспериментальные результаты для поляризации  $\Lambda$ ,  $\bar{\Lambda}$  гиперонов дают следующую оценку средней завихренности образованной КГП  $\omega = (9 \pm 1) \cdot 10^{21} \text{ с}^{-1}$  [1]. Такое большое значение угловой скорости приводит к релятивистскому вращению, что может существенным образом повлиять на свойства КГП.

Существует множество теоретических работ, целью которых является изучение влияния реляти-

вистского вращения на свойства теории сильного взаимодействия – КХД. Эти исследования выполнены с использованием различных моделей, включая модель Намбу–Йона–Лазино [2–9], модель адронного резонансного газа [10], голографического подхода к КХД [11–14] и других методов [15–17]. Несмотря на интересные результаты, полученные в этих работах, аналитические методы изучения КХД обладают серьезными недостатками, связанными с тем, что КХД – чрезвычайно сложная теория, аналитическое изучение которой без дополнительных предположений в настоящее время невозможно. В свою очередь, дополнительные предположения приводят к неконтролируемым систематическим ошибкам в результатах. Поэтому сложно оценить, насколько достоверны полученные предсказания.

Указанная выше проблема отсутствует, если результаты получены в рамках решеточного моделирования КХД. Этот метод позволяет проводить изучение свойств КХД, основываясь на первопринципах квантовой теории поля, при этом контролируя

<sup>1)</sup>e-mail: vvbraguta@theor.jinr.ru; ilyakudrov@yandex.ru; roenko@theor.jinr.ru; sychev.da@phystech.edu; maxim.chernodub@univ-tours.fr

ошибки таких вычислений. В этой статье будет использован именно такой метод для изучения глюодинамики. Отметим, что первая работа по изучению свойств вращающейся КХД была представлена в статье [18]. Позже, используя метод решеточного моделирования, было исследовано влияние вращения на термодинамические свойства глюодинамики [19–21] и КХД [22, 23].

Наша работа посвящена изучению влияния вращения на свойства КХД методом решеточного моделирования. В частности, будет изучен вопрос, каким образом вращение влияет на уравнение состояния глюодинамики. Для этого мы вычислим первую ненулевую поправку по угловой скорости к свободной энергии изучаемой системы. Стоит упомянуть, что уравнение состояния глюодинамики и КХД, а также влияние на него различных экстремальных условий, интенсивно изучалось в рамках решеточного моделирования (см., например, [24–28]). Уравнение состояния вращающейся глюодинамики ранее изучалось в работе [29]. В нашей работе будет проведено аналогичное исследование, но с использованием другого способа вычислений.

**Решеточное моделирование вращающейся глюодинамики.** В этом разделе мы кратко опишем, как проводится изучение вращающейся глюодинамики методами решеточного моделирования, а также выведем формулы, необходимые для проведения вычислений. Более детальное описание этого подхода можно найти в работах [19, 20].

Мы переходим во вращающуюся вместе с изучаемой “средой” систему отсчета и вычисляем методами Монте-Карло статистическую сумму равновесной системы. В нашей статье предполагается, что система вращается вокруг оси  $z$ . В этой системе отсчета вращение проявляется в виде внешнего гравитационного поля, которое задается известным метрическим тензором

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 - r^2\Omega^2 & \Omega y & -\Omega x & 0 \\ \Omega y & -1 & 0 & 0 \\ -\Omega x & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$  – расстояние до оси вращения.

Статистическая сумма глюодинамики, находящейся во внешнем гравитационном поле, в непрерывном пространстве может быть записана в виде интеграла по глюонным степеням свободы [18–20]:

$$Z = \int DA \exp(-S_G), \quad (2)$$

где Евклидово действие глюонного поля во внешнем гравитационном поле

$$S_G = \frac{1}{2g_{YM}^2} \int d^4x \sqrt{g_E} g_E^{\mu\nu} g_E^{\alpha\beta} F_{\mu\alpha}^a F_{\nu\beta}^a \quad (3)$$

зависит от метрического тензора в Евклидовом пространстве  $(g_E)_{\mu\nu}$ , который может быть получен из (1) с помощью операции Виковского поворота  $t \rightarrow i\tau$ . Как и в статистической сумме без гравитации, Евклидово время  $\tau$  изменяется в диапазоне  $\tau \in (0, \beta)$ , а на глюонные поля наложены периодические граничные условия в Евклидовом времени  $A_\mu^a(0, \mathbf{x}) = A_\mu^a(\beta, \mathbf{x})$ . В наших формулах греческие буквы отвечают Лоренцевым индексам, а латинские – цветовым.

Подставляя метрический тензор  $(g_E)_{\mu\nu}$  в формулу (3), получаем следующее выражение для действия

$$\begin{aligned} S_G = & \frac{1}{2g_{YM}^2} \int d^4x \text{Tr}[(1 - r^2\Omega^2)F_{xy}^a F_{xy}^a + \\ & + (1 - y^2\Omega^2)F_{xz}^a F_{xz}^a + (1 - x^2\Omega^2)F_{yz}^a F_{yz}^a + \\ & + F_{x\tau}^a F_{x\tau}^a + F_{y\tau}^a F_{y\tau}^a + F_{z\tau}^a F_{z\tau}^a - \\ & - 2iy\Omega(F_{xy}^a F_{y\tau}^a + F_{xz}^a F_{z\tau}^a) + \\ & + 2ix\Omega(F_{yx}^a F_{x\tau}^a + F_{yz}^a F_{z\tau}^a) - 2xy\Omega^2 F_{xz}^a F_{zy}^a]. \quad (4) \end{aligned}$$

Из этой формулы видно, что действие является комплексной величиной, что приводит к проблеме знака. К сожалению, прямое Монте-Карло моделирование таких систем в настоящее время невозможно. Для преодоления этой проблемы можно применить метод, который основан на моделировании системы при мнимой угловой скорости [18, 20–29]. Отметим, что этот метод был использован при изучении уравнения состояния глюодинамики в работе [29]. В нашей работе используется другой подход. Ниже будет показано, что свободную энергию можно разложить в ряд по угловой скорости. Коэффициенты этого разложения являются некоторыми операторами глюонных полей, которые можно вычислить с помощью моделирования системы без вращения. Таким образом, проблемы знака в таком подходе не возникает.

Дискретизация действия (4) с мнимой угловой скоростью проводится аналогично тому, как это сделано в работах [18–20]. В нашей работе мы не показываем явный вид выражения для решеточного действия вследствие его громоздкости. Как было указано выше, для вычисления поправок к свободной энергии по угловой скорости достаточно провести решеточное моделирование невращающейся системы. Для этого мы используем улучшенное на древесном уровне действие Симанчика [30, 31].

При моделировании вращающихся систем особую важность приобретают граничные условия. В наших вычислениях мы накладываем периодические граничные условия в направлениях  $\tau$  и  $z$ . Что же касается граничных условий в направлениях, перпендикулярных к оси вращения, то здесь возможно несколько вариантов: периодические граничные условия, открытые граничные условия и условия Дирихле. Детальное исследование различных граничных условий и их влияния на наблюдаемые было проведено в работе [20]. Вычисления показали, что зависимость различных наблюдаемых от граничных условий несущественна. Это связано с тем, что граничные условия экранируются и их влияние не распространяется на объем исследуемой системы. В данной работе мы используем периодические граничные условия, которые обычно используются при решеточном моделировании калибровочных теорий поля (глюодинамики) без вращения.

Основной целью нашей работы является изучение влияния вращения на уравнение состояния, которое может быть найдено, если известна свободная энергия изучаемой системы  $F$ . Поэтому в нашей работе будет проведено изучение влияния вращения на свободную энергию глюодинамики. Для этого мы раскладываем свободную энергию в ряд по угловой скорости

$$F = F_0 - \frac{\Omega^2}{2} F_2 + O(\Omega^4) \quad (5)$$

где  $F_0$  – свободная энергия глюодинамики без вращения, а  $F_2$  – следующий коэффициент разложения. Отметим, что свободная энергия глюодинамики  $F_0$  хорошо изучена (см., например, [24]), а коэффициент  $F_2$  будет вычислен в нашей работе. Свободная энергия может быть разложена и дальше, однако, к сожалению, из-за быстрого роста статистических ошибок вычислений с размером системы, который обусловлен структурой изучаемых операторов, в этой работе мы ограничимся изучением только второго коэффициента разложения. Ниже, помимо  $F_0$  и  $F_2$ , будут использоваться удельные величины  $f_0 = F_0/V$  и  $f_2 = F_2/V$ , где  $V$  – объем исследуемой системы.

Для того, чтобы найти выражение  $F_2$ , заметим, что действие (4) можно представить в виде:

$$S_G = S_0 + \Omega S_1 + \frac{\Omega^2}{2} S_2, \quad (6)$$

$$S_1 = \frac{i}{g_{YM}^2} \int d^4x [x F_{yx}^a F_{x\tau}^a + x F_{yz}^a F_{z\tau}^a - y F_{xy}^a F_{y\tau}^a - y F_{xz}^a F_{z\tau}^a], \quad (7)$$

$$S_2 = -\frac{1}{g_{YM}^2} \int d^4x [r^2 (F_{xy}^a)^2 + y^2 (F_{xz}^a)^2 + x^2 (F_{yz}^a)^2 + 2xy F_{xz}^a F_{zy}^a], \quad (8)$$

где  $S_0$  – действие глюонного поля без вращения. Используя эти формулы, выражение для коэффициента  $F_2$  может быть записано в виде:

$$F_2 = T \frac{\partial^2 \log Z}{\partial \Omega^2} \Big|_{\Omega=0} = T (\langle S_2 \rangle_T - \langle S_1^2 \rangle_T), \quad (9)$$

где обозначение  $\langle \mathcal{O} \rangle_T = \langle \mathcal{O} \rangle - \langle \mathcal{O} \rangle_{T=0}$  соответствует вкладу тепловых флуктуаций в среднее значение оператора  $\mathcal{O}$ .

Отметим, что первый член  $T \langle S_2 \rangle_T$  в этой формуле соответствует среднему квадрату хромоманнитного поля в исследуемой среде, а второй член  $-T \langle S_1^2 \rangle_T$  учитывает флуктуации углового момента глюонного поля (здесь учтено, что  $\langle S_1 \rangle_T|_{\Omega=0} = 0$ ).

Для вычисления коэффициента  $F_2$  по формуле (9) достаточно провести решеточное моделирование глюодинамики без вращения. Поэтому, как мы уже замечали, проблемы знака в наших вычислениях не возникает. Отметим, что в работе [29] изучалась зависимость свободной энергии от угловой скорости другим методом. При этом вычисление было проведено путем решеточного моделирования глюодинамики, которая вращается с мнимой угловой скоростью. Для исследования свободной энергии была посчитана производная статистической суммы по обратной константе связи  $1/g_{YM}^2$ . Эта производная связана со средним значением действия глюонного поля  $\langle S_G \rangle_T$  (4). Зная производную свободной энергии, путем интегрирования по обратной константе связи была вычислена свободная энергия.

Обычно при изучении уравнения состояния проводится вычитание соответствующего оператора при  $T = 0$ . Аналогично, при вычислении коэффициента  $F_2$  при конечной температуре в выражении (9) проведено вычитание при нулевой температуре. Физически эта процедура означает, что вакуум глюодинамики при  $T = 0$  не вращается.

Формулы (6), (9) позволяют найти разложение свободной энергии по угловой скорости для непрерывной теории. Нетрудно найти решеточную версию этих формул. Для этого заметим, что решеточное выражение для действия во вращающейся системе отсчета может быть представлено в виде разложения (6). Явный вид решеточных операторов  $S_1$  и  $S_2$  можно найти в работе [20]. Здесь мы их не приводим ввиду их громоздкости. Решеточная формула (9) для коэффициента разложения  $F_2$  имеет такой же вид, подразумевая решеточные выражения для операторов  $S_1$  и  $S_2$ .

Коэффициент разложения  $F_2$  связан с моментом инерции системы. Это можно увидеть, если воспользоваться формулой

$$I = \frac{M}{\Omega} = -\frac{1}{\Omega} \frac{\partial F}{\partial \Omega} = F_2, \quad (10)$$

где  $M$  – угловой момент системы. Далее воспользуемся нерелятивистским выражением для момента инерции, чтобы оценить зависимость коэффициента  $F_2$  от объема исследуемой системы:

$$\begin{aligned} I &= \int dV r^2 \rho(T, x, \Omega) = \frac{1}{6} \rho_0(T) L_z L_s^4 = \\ &= \frac{1}{6} \rho_0(T) V L_s^2, \end{aligned} \quad (11)$$

где  $\rho(T, x, \Omega)$  – массовая плотность в исследуемой системе, которая имеет геометрию параллелепипеда с размерами  $L_s \times L_s \times L_z$ , а  $V = L_z L_s^2$  – объем исследуемой системы. Ось вращения проходит через центр параллелепипеда и направлена вдоль оси  $z$ . Во втором равенстве было учтено, что в лидирующем приближении плотность не зависит от угловой скорости и координат, т.е. задается некоторой функцией  $\rho_0(T)$ , которая зависит только от температуры.

Выражение (11) позволяет переписать разложение (5) в более удобном для анализа результатов виде

$$F = F_0 \left( 1 + \frac{1}{2} K_2 v^2 \right), \quad (12)$$

где введены следующие обозначения: коэффициент  $K_2 = -4F_2/(F_0 L_s^2)$ , а  $v = \Omega L_s/2$  – скорость вращения на границе исследуемой системы (а именно, в центре боковой грани на расстоянии  $L_s/2$  от оси вращения). В последнем выражении мы перешли от коэффициента  $F_2$  к коэффициенту  $K_2$ , так как этот коэффициент безразмерен и, как следует из формулы (11), для достаточно большой системы не должен зависеть от ее объема. В следующем разделе мы проверим это утверждение. Отметим также, что  $F_0$  и  $F_2$  зависят от граничных условий, однако, как показывают наши вычисления, в отношении  $F_2/F_0$  эта зависимость в пределах ошибки сокращается.

**Результаты вычислений и обсуждение.** В этом разделе будет проведено вычисление коэффициента  $K_2$  методами решеточного моделирования. Ниже будут использоваться следующие обозначения для размеров решеток:  $N_t \times N_z \times N_s^2$  ( $N_s = N_x = N_y$ ). Для взятия непрерывного предела  $1/N_t \rightarrow 0$  (шаг решетки  $a \rightarrow 0$ ) проведено моделирование на решетках  $4 \times 16 \times 21^2$ ,  $5 \times 20 \times 25^2$ ,  $6 \times 24 \times 31^2$ . Указанные размеры решеток были выбраны так, чтобы

при вариации  $N_t$  приблизительно сохранялись величины  $N_s/N_t = L_s T$ ,  $N_z/N_t = L_z T$ , где  $L_z = N_z a$ ,  $L_s = N_s a$ ,  $1/T = N_t a$ . Размер решетки в направлениях  $x, y$  выбран таким образом, чтобы при вычислении операторов (7), (8) ось вращения проходила через узел решетки и соответствующие решеточные операторы обладали симметрией относительно этой оси. Как было сказано выше, для вычисления коэффициента  $F_2$  при конечной температуре проводится вычитание этого же коэффициента при нулевой температуре. В этой процедуре мы используем решетки с теми же пространственными размерами, но с  $N_t = N_z$ .

На рисунке 1 представлено отношение  $f_2/(T^4 L_s^2)$  как функция температуры для решеток с разным количеством шагов по времени  $N_t$ . На графике  $T_c$  – критическая температура перехода конфайнмент/деконфайнмент в глюодинамике без вращения.

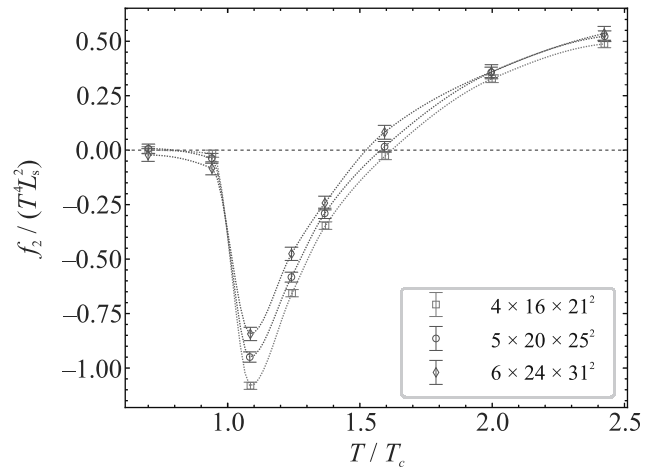


Рис. 1. (Цветной онлайн) Отношение  $f_2/(T^4 L_s^2)$  как функция температуры для решеток с разным количеством шагов по времени  $N_t$ .  $T_c$  обозначает критическую температуру перехода конфайнмент/деконфайнмент в глюодинамике без вращения

Для изучения зависимости наших результатов от размера системы мы провели вычисление отношения  $f_2/(T^4 L_s^2)$  на решетках  $5 \times 16 \times 25^2$ ,  $5 \times 24 \times 25^2$ ,  $5 \times 20 \times 21^2$ ,  $5 \times 20 \times 31^2$ . На рисунке 2 представлено отношение  $f_2/(T^4 L_s^2)$  как функция температуры для решеток с разным пространственным объемом в  $xy$ - и  $z$ -направлениях. Из этого графика видно, что зависимость отношения  $f_2/(T^4 L_s^2)$  от размеров системы  $L_s$  и  $L_z$  слаба, что подтверждает оценку, сделанную в формуле (11).

Для вычисления коэффициента  $K_2$  на решетках  $4 \times 16 \times 21^2$ ,  $5 \times 20 \times 25^2$ ,  $6 \times 24 \times 31^2$  мы вычислили  $F_0$  и  $F_2$ . Затем были построены отношения

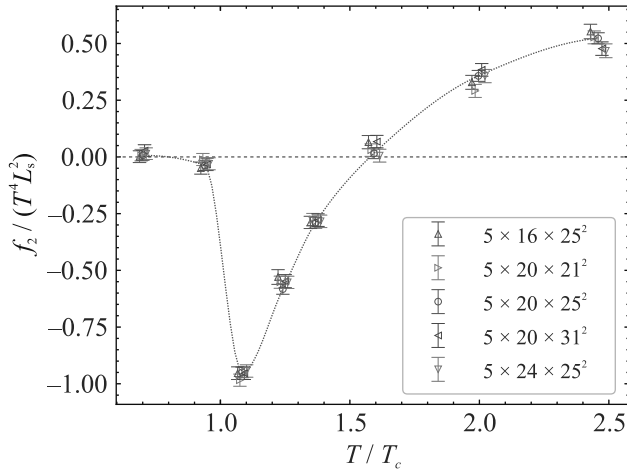


Рис. 2. (Цветной онлайн) Отношение  $f_2/(T^4 L_s^2)$  как функция температуры для решеток с разным пространственным объемом в  $xy$ - и  $z$ -направлениях

$K_2 = -4F_2/(F_0 L_s^2)$ , для которых взят непрерывный предел  $1/N_t \rightarrow 0$ . На рисунке 3 представлен коэффициент  $K_2$  как функция температуры для решеток с различными значениями  $N_t$ . Непрерывный предел  $1/N_t \rightarrow 0$  показан на рисунке точками в форме звездочек. Результаты непрерывного предела аппроксимированы сплайном. Отметим, что на рис. 3 показан диапазон температур  $T > T_c$ . Это связано с тем, что при  $T < T_c$  значение  $F_0$  близко к нулю, при этом ошибки вычислений значительно возрастают. Поэтому график для коэффициента  $K_2$  ниже критической температуры становится неинформативным. Рисунок 3 является главным результатом нашей работы.

Отметим, что коэффициент  $K_2$  был посчитан в работе [29]. При этом вычисление проводилось методом, который отличается от подхода, использованного в этой работе. Напомним, что в этой работе проведено решеточное моделирование глюодинамики без вращения, и вычисляется непосредственно первая ненулевая поправка к свободной энергии по угловой скорости. В то время как в работе [29] моделируется вращающаяся глюодинамика, вычисляется свободная энергия для различных скоростей вращения, и только в конце вычислений проводится разложение по (мнимой) угловой скорости, после чего результаты аналитически продолжают в область действительных значений  $\Omega$ . Сравнение показывает, что оба описанных метода дают результаты, которые согласуются между собой.

Как видно из рис. 3, коэффициент  $K_2$  отрицателен для температур  $T < T^*$  и становится положительным при  $T > T^*$ , где  $T^* \sim 1.5T_c$ . Соглас-

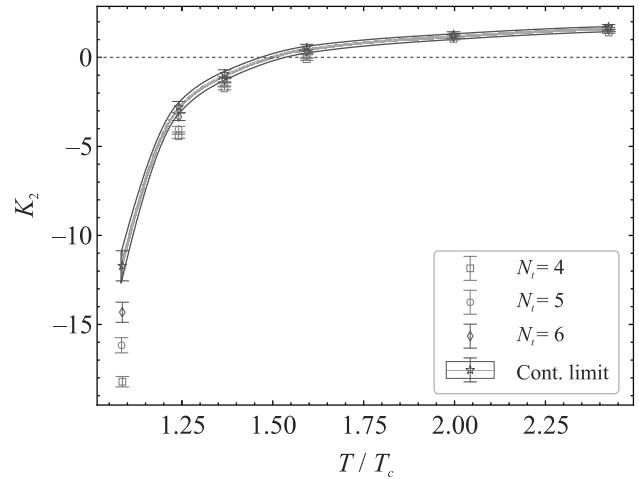


Рис. 3. (Цветной онлайн) Коэффициент  $K_2$  как функция температуры для решеток с различными значениями  $N_t$ . Непрерывный предел  $1/N_t \rightarrow 0$  показан на рисунке точками в форме звездочек. Результаты непрерывного предела аппроксимированы сплайном

но формуле (10), этот коэффициент связан с моментом инерции исследуемой системы по формуле  $I = -K_2 F_0 L_s^2 / 4$ . Учитывая тот факт, что  $f_0 = -p < 0$ , рис. 3 означает, что момент инерции глюодинамики отрицателен вплоть до температуры  $T^* \sim 1.5T_c$  и только выше этой температуры становится положительным. Мы предполагаем, что отрицательный момент инерции означает термодинамическую неустойчивость глюонной плазмы по отношению к вращению с постоянной угловой скоростью<sup>2)</sup>. Таким образом, возможно термодинамически равновесное вращение плазмы с постоянной угловой скоростью при температуре выше  $T^*$ . При температуре ниже  $T^*$  термодинамически стабильным является более сложное движение глюонной плазмы, например, при котором угловая скорость вращения зависит от координат. Однако для понимания физических механизмов этой неустойчивости требуются дополнительные исследования.

Чтобы понять причину возникновения отрицательного момента инерции, рассмотрим формулу (9). Из нее видно, что выражение для  $F_2$  является суммой двух операторов. Первый оператор  $\sim \langle\langle S_2 \rangle\rangle_T$  связан с квадратом хромагнитного поля в глюодинамике, который входит в важную физическую величину – глюонный конденсат  $\sim \langle\langle (G_{\mu\nu}^a)^2 \rangle\rangle_T \sim \langle\langle (\mathbf{E}^a)^2 \rangle\rangle_T + \langle\langle (\mathbf{H}^a)^2 \rangle\rangle_T$ . В глюодинамике этот опера-

<sup>2)</sup> Стоит упомянуть, что отрицательный момент инерции может быть реализован в некоторых системах [32–34], а термодинамическая неустойчивость, связанная с вращением, реализуется во вращающихся черных дырах [35–37].

тор определяет энергию вакуума при  $T = 0$  и нарушение масштабной инвариантности. При увеличении температуры магнитная компонента глюонного конденсата уменьшается от своего значения при  $T = 0$ , достигает некоторого минимального значения, после чего начинает расти [24]. Вклад тепловых флуктуаций в среднее этого оператора, пропорциональный  $\langle\langle(\mathbf{H}^a)^2\rangle\rangle_T$ , который и входит в формулу (9), является отрицательным при  $T > 0$  и только при температурах выше  $T \sim 2T_c$  становится положительным [24]. Второй оператор  $\sim \langle\langle S_1^2\rangle\rangle_T$ , который связан с флуктуацией углового момента, дает положительный вклад в момент инерции и незначительно смещает его значение в положительную сторону. Таким образом, отрицательный момент инерции глюодинамики в области температур  $T < T^*$  объясняется вкладом магнитной компоненты масштабной аномалии.

Как следует из формулы (12) и данных для  $K_2(T)$ , в окрестности перехода конфайнмент/деконфайнмент вращение уменьшает свободную энергию глюодинамики. Поэтому можно ожидать, что при  $\Omega \neq 0$  необходимо дополнительно “нагреть” исследуемую систему, чтобы произошел этот фазовый переход. Более того, чем больше угловая скорость, тем больший разогрев системы требуется. Это простое рассуждение позволяет заключить, что при вращении критическая температура перехода конфайнмент/деконфайнмент должна повышаться и большей угловой скорости должна соответствовать большая критическая температура. Таким образом, результат, полученный в этой работе, находится в качественном согласии с результатами, полученными ранее в работах [19, 20].

Авторы благодарят О. В. Теряева за полезные обсуждения результатов работы. Работа была выполнена с использованием оборудования центра коллективного пользования “Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса” НИЦ “Курчатовский институт”, <http://ckp.nrcki.ru/>. Также авторы использовали суперкомпьютер ОИЯИ “Говорун”.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда # 23-12-00072, <https://rscf.ru/project/23-12-00072/>.

1. L. Adamczyk, J. K. Adkins, G. Agakishiev, et al. (STAR), *Nature* **548**, 62 (2017); arXiv:1701.06657 [nucl-ex].
2. S. Ebihara, K. Fukushima, and K. Mameda, *Phys. Lett. B* **764**, 94 (2017); arXiv:1608.00336 [hep-ph].
3. M. Chernodub and S. Gongyo, *JHEP* **01**, 136 (2017); arXiv:1611.02598 [hep-th].

4. Y. Jiang and J. Liao, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 192302 (2016); arXiv:1606.03808 [hep-ph].
5. H. Zhang, D. Hou, and J. Liao, *Chin. Phys. C* **44**, 111001 (2020); arXiv:1812.11787 [hep-ph].
6. X. Wang, M. Wei, Z. Li, and M. Huang, *Phys. Rev. D* **99**, 016018 (2019); arXiv:1808.01931 [hep-ph].
7. M. N. Chernodub, *Phys. Rev. D* **103**, 054027 (2021); arXiv:2012.04924 [hep-ph].
8. X. Chen, L. Zhang, D. Li, D. Hou, and M. Huang, *JHEP* **07**, 132 (2021); arXiv:2010.14478 [hep-ph].
9. N. Sadooghi, S. M. A. Tabatabaee Mehr, and F. Taghinavaz, *Phys. Rev. D* **104**, 116022 (2021); arXiv:2108.12760 [hep-ph].
10. Y. Fujimoto, K. Fukushima, and Y. Hidaka, *Phys. Lett. B* **816**, 136184 (2021); arXiv:2101.09173 [hep-ph].
11. A. A. Golubtsova, E. Gourgoulhon, and M. K. Usova, *Nucl. Phys. B* **979**, 115786 (2022); arXiv:2107.11672 [hep-th].
12. Y.-Q. Zhao, S. He, D. Hou, L. Li, and Z. Li (2022), arXiv:2212.14662 [hep-ph].
13. A. A. Golubtsova and N. S. Tsegel'nik (2022), arXiv:2211.11722 [hep-th].
14. N. R. F. Braga, L. F. Ferreira, and O. C. Junqueira (2023), arXiv:2301.01322 [hep-th].
15. M. N. Chernodub (2022), arXiv:2210.05651 [quant-ph].
16. M. N. Chernodub, (2022), arXiv:2208.04808 [hep-th].
17. S. Chen, K. Fukushima, and Y. Shimada, *Phys. Rev. Lett.* **129**, 242002 (2022); arXiv:2207.12665 [hep-ph].
18. A. Yamamoto and Y. Hirono, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 081601 (2013); arXiv:1303.6292 [hep-lat].
19. V. V. Braguta, A. Y. Kotov, D. D. Kuznedev, and A. A. Roenko, *JETP Lett.* **112**, 6 (2020).
20. V. V. Braguta, A. Y. Kotov, D. D. Kuznedev, and A. A. Roenko, *Phys. Rev. D* **103**, 094515 (2021); arXiv:2102.05084 [hep-lat].
21. M. N. Chernodub, V. A. Goy, and A. V. Molochkov, (2022), arXiv:2209.15534 [hep-lat].
22. V. V. Braguta, A. Kotov, A. Roenko, and D. Sychev, *PoS LATTICE2022*, 190 (2023); arXiv:2212.03224 [hep-lat].
23. V. Braguta, A. Y. Kotov, D. Kuznedev, and A. Roenko, *PoS LATTICE2021*, 125 (2022); arXiv:2110.12302 [hep-lat].
24. G. Boyd, J. Engels, F. Karsch, E. Laermann, C. Legeland, M. Lutgemeier, and B. Petersson, *Nucl. Phys. B* **469**, 419 (1996); arXiv:heplat/9602007.
25. C. Bonati, M. D'Elia, M. Mariti, F. Negro, and F. Sanfilippo, *Phys. Rev. D* **89**, 054506 (2014); arXiv:1310.8656 [hep-lat].
26. A. Bazavov, T. Bhattacharya, C. DeTar et al. (HotQCD), *Phys. Rev. D* **90**, 094503 (2014); arXiv:1407.6387 [hep-lat].
27. S. Borsányi, Z. Fodor, C. Hoelbling, S. D. Katz, S. Krieg, and K. K. Szabó, *Phys. Lett. B* **730**, 99 (2014).

28. J.N. Guenther, R. Bellwied, S. Borsanyi, Z. Fodor, S.D. Katz, A. Pasztor, C. Ratti, and K.K. Szabó, Nucl. Phys. A **967**, 720 (2017); arXiv:1607.02493 [hep-lat].
29. V.V. Braguta, M.N. Chernodub, A.A. Roenko, and D.A. Sychev (2023), arXiv:2303.03147 [hep-lat].
30. G. Curci, P. Menotti, and G. Paffuti, Phys. Lett. B **130**, 205 (1983).
31. M. Lüscher and P. Weisz, Phys. Lett. B **158**, 250 (1985).
32. J. Lončar, B. Igrac, and D. Babić, Symmetry **14**, 529 (2022).
33. M.N. Chernodub, Phys. Rev. D **87**, 025021 (2013); arXiv:1207.3052 [quant-ph].
34. A. Flachi and M. Edmonds, Phys. Rev. D **107**, 025008 (2023); arXiv:2212.02776 [hep-th].
35. B.F. Whiting and J.W. York, Jr., Phys. Rev. Lett. **61**, 1336 (1988).
36. T. Prestidge, Phys. Rev. D **61**, 084002 (2000); 10.1103/physrevd.61.084002.
37. H.S. Reall, Phys. Rev. D **64**, 044005 (2001); 10.1103/physrevd.64.044005.

# Загадка мюонов в ШАЛ сверхвысоких энергий по данным Якутской установки и эксперимента Ожэ

А. В. Глушков<sup>1)</sup>, А. В. Сабуров<sup>1)</sup>, Л. Т. Ксенофонов<sup>1)</sup>, К. Г. Лебедев<sup>1)</sup>

Институт космических исследований и аэронавтики им. Ю. Г. Шафера Сибирского отделения РАН,  
677027 Якутск, Россия

Поступила в редакцию 22 февраля 2023 г.

После переработки 31 марта 2023 г.

Принята к публикации 4 апреля 2023 г.

Рассмотрено пространственное распределение частиц широких атмосферных ливней от космических лучей в области энергий выше  $10^{17}$  эВ, зарегистрированных на Якутской комплексной установке. Экспериментально измеренные плотности частиц сопоставляются с предсказаниями, полученными в рамках трех моделей адронных взаимодействий при сверхвысоких энергиях. Оценка массового состава, полученная из показаний наземных и подземных детекторов установки, согласуется с оценками, сделанными на основе измерений пространственного распределения черенковского излучения атмосферных ливней. Приводится сравнение с результатами прямых измерений мюонной компоненты, выполненных на установке Ожэ. Показано, что плотности потока мюонов, измеренные на Якутской установке, согласуются с флуоресцентными измерениями и не согласуются с мюонными результатами, полученными на установке Ожэ.

DOI: 10.31857/S1234567823090033, EDN: boiupi

**1. Введение.** Проблема повышенного содержания мюонов в широких атмосферных ливнях (ШАЛ) от космических лучей (КЛ) сверхвысоких энергий (КЛСВЭ) в сравнении с модельными предсказаниями отмечается исследователями уже больше 20 лет [1]. В совместном анализе, опубликованном международной рабочей группой по этой проблеме, были рассмотрены данные восьми установок: ШАЛ-МГУ, IceCube, KASCADE-Grande, NEVOD-DECOR, The Pierre Auger Observatory (Ожэ), SUGAR, Telescope Array (ТА) и Якутской комплексной установки [2]. Для сравнения данных разных экспериментов был введен безразмерный масштабный параметр:

$$z = \frac{\ln \rho_{\text{MD}}^{\text{exp}} - \ln \rho_{\text{MD}}^p}{\ln \rho_{\text{MD}}^{\text{Fe}} - \ln \rho_{\text{MD}}^p}, \quad (1)$$

где  $\rho_{\text{MD}}^{\text{exp}}$  – плотность мюонов, измеренная на эксперименте;  $\rho_{\text{MD}}^p$  и  $\rho_{\text{MD}}^{\text{Fe}}$  – плотности мюонов, вычисленные в ливнях от первичных протонов ( $p$ ) и ядер железа (Fe) для детекторов конкретных установок ШАЛ. В результате было показано, что модельные расчеты согласуются вплоть до  $10^{16}$  эВ. Однако при дальнейшем увеличении первичной энергии картина меняется. Наблюдается широкий разброс величины  $z$ , особенно в области предельно высоких энергий, сильно

наклонных ШАЛ [3] и на больших расстояниях от оси ливня [4]. В случае Якутской установки были использованы плотности мюонов, вычисленные на расстоянии от оси 300 м в ливнях с первичной энергией  $E_0 \geq 10^{18}$  эВ и средним зенитным углом прихода  $\langle \cos \theta \rangle = 0.9$ . В случае модели QGSJet01 [5] они дали величину параметра  $z \simeq 0$ , а для QGSJet-II.04 [6] и EPOS-LHC [7] – отрицательные значения [2]. В работе [8] исследована доля мюонов на расстояниях от оси 300, 600 и 1000 м в ливнях с  $E_0 \simeq 10^{17.7-19.5}$  эВ и  $\langle \cos \theta \rangle = 0.9$ . В работах [9, 10] рассмотрены зенитно-угловые зависимости доли мюонов на расстоянии 600 м от оси в ливнях с  $E_0 \simeq 10^{18}$  и  $10^{19}$  эВ с зенитными углами  $\cos \theta \geq 0.5$ . В работах [8–10] было подтверждено согласие эксперимента с предсказаниями модели QGSJet01 в случае первичных протонов ( $z \simeq 0$ ).

Коллаборация Ожэ сообщила о прямых измерениях мюонов в ШАЛ с энергиями  $2 \times 10^{17} - 2 \times 10^{18}$  эВ и зенитными углами  $\theta \leq 45^\circ$  [11]. Измерения проводились сцинтилляционными детекторами площадью 5 и 10 м<sup>2</sup> с порогом регистрации  $\simeq 1.0 \times \sec \theta$  ГэВ (помещенными под слоем грунта толщиной 2.3 м). Один из результатов приведен на рис. 1. В работе рассматривался параметр  $\rho_{\text{MD}}(450, 35^\circ)$  – плотность мюонов, измеренная в индивидуальных ливнях на расстоянии от оси 450 м и приведенная к зенитному углу  $35^\circ$  с помощью соотношений:

<sup>1)</sup>e-mail: glushkov@ikfia.ysn.ru; vs.tema@gmail.com; ksenofon@ikfia.ysn.ru; LebedevKG@ikfia.ysn.ru



$$\rho_{\text{MD}}(450, 35^\circ) = \frac{\rho_{\text{MD}}(450, \theta)}{f_{\text{att}}(\theta)}, \quad (2)$$

$$f_{\text{att}}(\theta) = 1 + (0.54 \pm 0.10)x + (1.02 \pm 0.69)x^2, \quad (3)$$

где  $x = \cos^2 \theta - \cos^2 35^\circ$ . Стоит подчеркнуть, что в этом эксперименте мюонная компонента ШАЛ на установке Ожэ была выделена непосредственно, аналогично тому, как это делается на Якутской установке. Прямая интерпретация результатов, изложенных в [11], не исключает происхождения рассмотренных событий от первичных ядер железа. Эти результаты противоречат не только выводам работ [8–10], но и измерениям, выполненным в том же эксперименте с использованием другого метода.

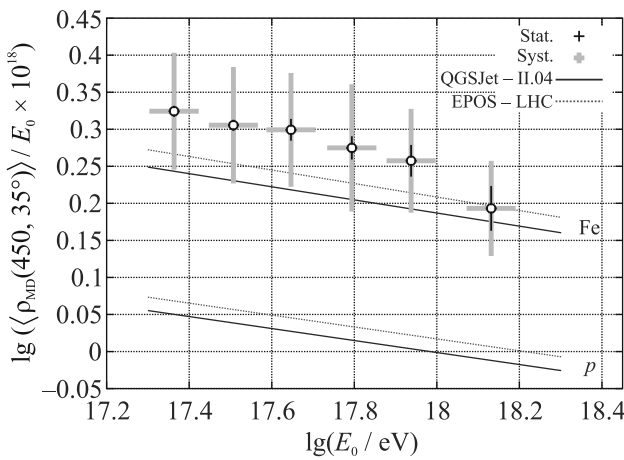


Рис. 1. (Цветной онлайн) Плотности мюонов в ШАЛ на расстоянии от оси 450 м, нормированные на первичную энергию. Результаты прямых измерений, выполненных на установке Ожэ на подземных сцинтилляционных детекторах с порогом  $\simeq 1.0 \times \sec 35^\circ$  ГэВ. Данные были взяты из рис. 11 в работе [11]

На рисунке 2 приведены оценки массового состава КЛ, полученные в нескольких экспериментах с помощью разных методик в рамках модели QGSJet-II.04. Показанные на нем результаты Якутской установки были получены тремя независимыми методами: из функции пространственного распределения (ФПР) мюонной компоненты, регистрируемой мюонными детекторами (MD) с порогом  $\simeq 1$  ГэВ [12]; из формы ФПР заряженной и электромагнитной компонент ШАЛ, регистрируемых наземными детекторами мастерных станций (SD) [13]; и путем измерения потока черенковского излучения (ЧИ) ШАЛ (CD) [14]. Видно, что в пределах ошибок эксперимента все три компоненты ШАЛ дают согласованные между собой результаты. Также они согласуются с оценками, полученными по данным ЧИ на установке Тунка-133 [15] и величинами, рассчитан-

ными из средних глубин максимума каскадной кривой ШАЛ ( $\langle x_{\text{max}} \rangle$ ), измеренных на установке ТА [16]. Оценки, вытекающие из значений параметра  $z$  установки Ожэ [11], представлены тремя наборами данных: согласно измерениям  $\langle x_{\text{max}} \rangle$  методом регистрации флуоресцентного излучения ШАЛ (FD), по измерениям мюонной компоненты с порогом  $\simeq 1$  ГэВ (MD) и наземной компоненты в сильно наклонных ливнях (SD). Как видно из рис. 2, прямые измерения мюонов ШАЛ подземными сцинтилляционными детекторами и в наклонных ливнях наземными детекторами на установке Ожэ выбиваются из общего тренда и побуждают рассмотреть их более подробно.

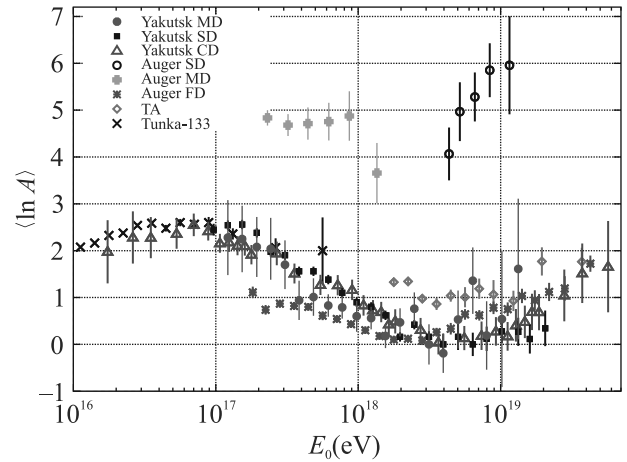


Рис. 2. (Цветной онлайн) Оценки среднего массового состава КЛ, вытекающие из данных нескольких экспериментов в рамках модели QGSJet-II.04. Результаты Якутской установки были получены с использованием трех независимых методик [12, 13, 14]. Оценки для установки Ожэ были получены из значений параметра  $z$ , рассчитанных в рамках модели QGSJet-II.04 для мюонных данных (Auger MD), станций наземного триггера (Auger SD) и результатов измерений  $\langle x_{\text{max}} \rangle$  (Auger FD) [11] (см. также Fig. 5). Также приведены данные установок Тунка-133 [15] и ТА [16]

В этой статье анализируются данные, полученные за многолетний период работы Якутской комплексной установки ШАЛ (ЯКУ ШАЛ). Проведено сравнение с результатами Оже [11]. Они имеют прямое отношение друг к другу. В обоих экспериментах для регистрации мюонов используются схожие сцинтилляционные детекторы и методики их калибровки по фону космических мюонов. Это позволило напрямую сравнить экспериментальные данные двух установок между собой.

**2. Пространственное распределение частиц ШАЛ по данным Якутской установки.** В работах [17, 18] были получены отклики наземных и под-

земных сцинтилляционных детекторов ЯКУ ШАЛ от частиц в ливнях, инициированных КЛ с энергией выше  $10^{17}$  эВ. С помощью кода CORSIKA [19] был рассчитан набор искусственных ливней с энергиями в диапазоне  $10^{17} - 10^{19.5}$  эВ с логарифмическим шагом  $\Delta \lg(E_0/\text{эВ}) = 0.5$  в диапазоне zenithных углов  $0^\circ - 60^\circ$ . Расчеты проведены с использованием моделей взаимодействий при сверхвысоких энергиях QGSJet01 [5], QGSJet-II.04 [6] и EPOS-LHC [7]. Адронные взаимодействия при энергиях ниже 80 ГэВ моделировались с помощью кода FLUKA2011 [20]. В расчетах был задействован механизм статистического прореживания [21] со степенью  $E_{\text{thin}} = (10^{-6} - 10^{-5})$  и ограничением по весу для всех компонент  $w_{\text{max}} = E_0 \cdot E_{\text{thin}}$ . Для каждого набора входных параметров  $(E_0, \theta)$  было разыграно по 200 событий, на основе статистики которых строилась средняя ФПР (СФПР) отклика детекторов с радиальным логарифмическим разбиением по расстоянию от оси с шагом  $\Delta \lg(r/\text{м}) = 0.04$ . На рисунке 3 приведены энергетические зависимости откликов наземных и подземных детекторов Якутской установки от частиц ШАЛ на расстоянии от оси 600 м, полученные с использованием трех моделей адронных взаимодействий. Все плотности приведены к первичной энергии  $10^{19}$  эВ путем их умножения на нормировочный коэффициент  $10^{19}/E_0$ . Средние плотности, найденные расчетным путем, сравнивались с величинами, полученными из экспериментальных данных методом построения СФПР.

**2.1. Полученные результаты.** Для анализа были отобраны ливни с осями, лежащими в центральном круге установки с радиусом 1 км и погрешностью лоцирования, не превышающей 50 м (табл. 1). Набор отобранных событий был разбит на интервалы (бины) по энергии с шагом  $\Delta \lg(E_0/\text{эВ}) = 0.2$ . В каждом бине строились СФПР плотностей частиц ШАЛ, измеренных наземными (SD) и подземными детекторами с порогом  $\simeq 1$  ГэВ (MD), из которых находились плотности на расстоянии 600 м от оси,  $\rho_{\text{SD}}(600, 25.8^\circ)$  и  $\rho_{\text{MD}}(600, 25.8^\circ)$ . Методика получения СФПР изложена в работе [8]. Точность найденных таким образом плотностей была не хуже 10%. Энергия ливней находилась по формуле:

$$E_0 = (3.76 \pm 0.30) \times 10^{17} \cdot \rho_{\text{SD}}(600, 0^\circ)^{1.02 \pm 0.02} [\text{эВ}], \quad (4)$$

где  $\rho_{\text{SD}}(600, 0^\circ)$  – приведенный к вертикальному направлению ливня классификационный параметр  $\rho_{\text{SD}}(600, 25.8^\circ)$  [22]. При построении СФПР плотности частиц обеих компонент ШАЛ умножались на нормировочный коэффициент  $E_{\text{bin}}/E_0$ , где  $E_{\text{bin}}$  – средняя энергия в бине.

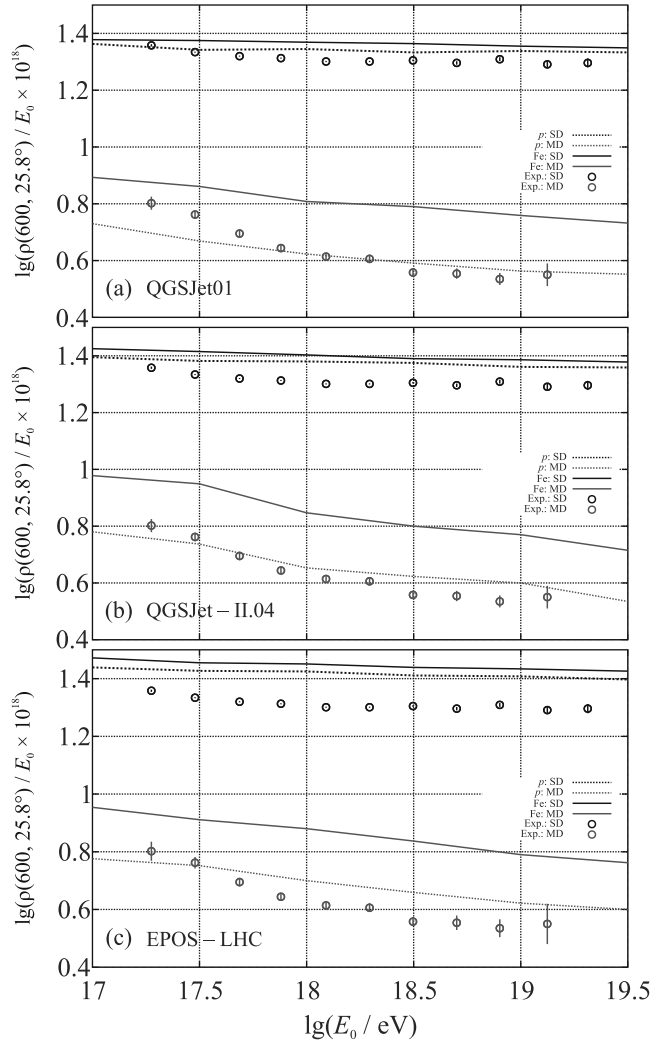


Рис. 3. (Цветной онлайн) Средние отклики наземных (SD) и подземных сцинтилляционных детекторов с порогом  $1.0 \times \text{sec } \theta$  ГэВ (MD) на расстоянии 600 м от оси, нормированные на энергию ШАЛ со средним zenithным направлением прихода  $\langle \cos \theta \rangle = 0.9$ . Линии – результаты расчетов, выполненных в рамках трех моделей адронных взаимодействий для первичных протонов ( $p$ ) и ядер железа ( $\text{Fe}$ ). Символы – средние значения, полученные из экспериментальных данных

На рисунке 3 видно, что измеренные наземными и подземными детекторами отклики частиц ШАЛ оказались меньше ожидаемых от первичных протонов, а плотности мюонов – существенно меньше. Такой результат возможен в силу разных причин. Одна из них может быть связана с оценкой энергии на эксперименте. Первый множитель в формуле (4) отражает систематическую ошибку 8% из-за неопределенности самого метода калибровки Якутской установки [22]. Чтобы понять полученный выше результат допустим, что энергия в ливнях на рис. 3 завы-

**Таблица 1.** Число ливней в выборках СФПР.  $N_{sh}$  число событий, вошедших в бин с данной средней энергией

$\langle \lg(E_0/\text{эВ}) \rangle$	17.28	17.48	17.68	17.88	18.09	18.29	18.49	18.70	18.90	19.12
$N_{sh}$	6079	6182	4807	2717	1316	600	260	107	60	16

шена на величину разногласия между теорией и экспериментом для наземных детекторов. В случае модели QGSJet01 достаточно уменьшить коэффициент пропорциональности в формуле (4) на  $\simeq 10\%$ , и на рис. 3 будет достигнуто согласие измеренных наземными детекторами плотностей с расчетными. Плотности мюонов из-за перенормировки энергии тоже поднимутся вверх на  $\simeq 10\%$ . В этом случае обе компоненты ШАЛ при  $E_0 > 10^{18}$  эВ в пределах ошибок эксперимента согласуются с расчетами. В области энергий ниже  $10^{18}$  эВ, по мере уменьшения первичной энергии, плотности мюонов идут все выше и выше. Это можно интерпретировать как изменение состава первичных частиц за счет добавления к протонам определенной доли более тяжелых ядер. На рисунке 1 наблюдается аналогичное поведение состава первичных частиц (утяжеление по мере уменьшения энергии), но на фоне ядер железа. Наземная компонента ШАЛ на рис. 3 показывает такую же тенденцию, но не столь ярко выраженную из-за слабой ее зависимости от мюонов. Модель QGSJet-II.04 дает аналогичный результат при уменьшении коэффициента пропорциональности в формуле (4) на  $\simeq 15\%$ , а EPOS-LHC – при уменьшении на  $\simeq 20\%$ .

На первый взгляд, полученные выше результаты критичны к первичной энергии. Однако в силу того, что СФПР обеих компонент ШАЛ на рис. 3 имеют общую выборку ливней со средней энергией  $E_{bin}$ , доля мюонов

$$\eta_{600}(E_0) = \frac{\langle \rho_{MD}(600) \rangle / E_{bin}}{\langle \rho_{SD}(600) \rangle / E_{bin}} = \frac{\langle \rho_{MD}(600) \rangle}{\langle \rho_{SD}(600) \rangle} \quad (5)$$

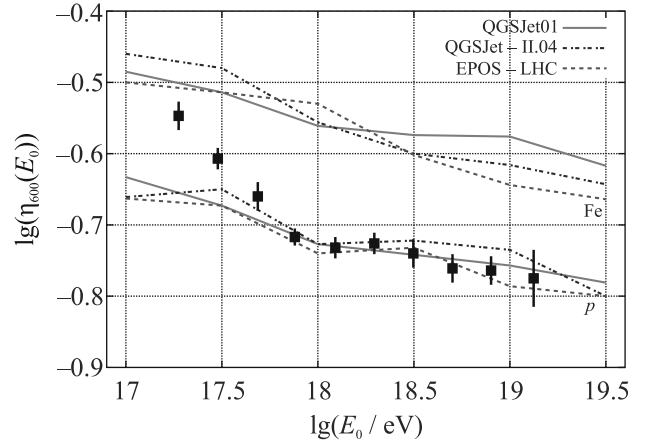
не зависит от энергии. На рисунке 4 показана доля мюонов  $\eta_{600}(E_0)$ , полученная из данных, приведенных на рис. 3.

Расчеты показывают, что параметр  $\eta_{600}$  передает физический смысл параметра  $z$  (1):

$$z = \frac{\ln \eta_{600}^{exp} - \ln \eta_{600}^p}{\ln \eta_{600}^{Fe} - \ln \eta_{600}^p}. \quad (6)$$

Полученные таким образом значения параметра  $z$  для разных интервалов энергии  $E_{bin}$  приведены в табл. 2. Все три модели при  $E_0 \geq 10^{17.7}$  эВ в пределах ошибок измерений не противоречат гипотезе о чисто протонном составе первичных КЛ ( $z \simeq 0$ ).

Ошибки суммируют как статистику ливней при построении средних ФПР, так и все другие ошиб-



**Рис. 4.** (Цветной онлайн) Энергетическая зависимость доли мюонов в ШАЛ со средним зенитным направлением  $\langle \cos \theta \rangle = 0.9$  на расстоянии 600 м от оси. Символами показаны значения, полученные из экспериментальных данных, линиями – теоретические предсказания, полученные в рамках трех моделей адронных взаимодействий для первичных протонов ( $p$ ) и ядер железа ( $Fe$ )

**Таблица 2.** Значения параметра  $z$ , вычисленные из доли мюонов на расстоянии от оси ШАЛ 600 м (рис. 4) с помощью соотношения (6). В колонке  $z$  приведены ошибки, учитывающие как систематические, так и статистические неопределенности

$\lg(E_{bin}/\text{эВ})$	QGSJet01		QGSJet-II.04		EPOS-LHC	
	$z$	$\delta z$	$z$	$\delta z$	$z$	$\delta z$
17.28	0.69	0.13	0.58	0.11	0.76	0.12
17.48	0.41	0.09	0.25	0.09	0.41	0.09
17.68	0.19	0.12	0.11	0.12	0.21	0.12
17.88	0.00	0.07	-0.04	0.07	0.04	0.07
18.09	0.00	0.09	-0.01	0.09	0.02	0.09
18.29	0.06	0.09	0.00	0.09	0.06	0.09
18.49	0.01	0.11	-0.06	0.16	-0.06	0.15
18.70	-0.07	0.11	-0.10	0.17	-0.06	0.14
18.90	-0.05	0.11	-0.06	0.13	0.07	0.14
19.12	-0.10	0.22	-0.06	0.29	0.08	0.28

ки, возникающие при обработке индивидуальных событий (калибровки детекторов, определении направления прихода и координат оси, энергию ШАЛ и др.). Их трудно разделить между собой, да и в этом нет необходимости. Они аккумулируются в средних величинах  $\rho_{SD}(600, \theta)$  и  $\rho_{MD}(600, \theta)$  (см., например, рис. 3).

Параметр  $z$  является частью простой и важной формулы

$$\langle \ln A \rangle = z \ln 56. \quad (7)$$

для оценки среднего атомного веса  $A$  ядра первичной частицы. Его связь с мюонами говорит лишь о том, что мюоны весьма чувствительны к составу КЛ. Но не только они одни. На рисунке 2 показаны оценки состава из других компонент ШАЛ. Сравнение значений параметра  $z$ , полученных Обсерваторией Ожэ и ЯКУ ШАЛ в рамках модели QGSJet-II.04, приведено на рис. 5. Данные Ожэ представлены величинами из плотностей частиц, измеренных мюонными детекторами (Auger MD) и наземными детекторами (Auger SD) на расстоянии 1000 м в наклонных ливнях. Они согласуются между собой и указывают на аномально высокие плотности мюонов. Также на рис. 5 приведены значения, полученные по данным измерений  $\langle x_{\max} \rangle$  (Auger FD). Эти данные были взяты из рис. 13b работы [11]. Они не противоречат ожидаемому в рамках модели QGSJet-II.04 легкому составу первичных частиц, близкому к протонному. Значения параметра  $z$  Якутской установки приведены в четвертой и пятой колонках таблицы 2. На рисунке 2 показаны значения  $\langle \ln A \rangle$ , полученные из изображенных на рис. 5 данных Ожэ (Auger MD), (Auger SD) и (Auger FD), с помощью формулы (7).

**3. Сравнение данных двух установок и обсуждение.** В работе [11] коллаборация Ожэ для регистрации мюонной компоненты ШАЛ использовала подземные сцинтилляционные детекторы с энергетическим порогом  $1.0 \times \sec \theta$  ГэВ, аналогично Якутскому эксперименту. Обе установки калибруют свои мюонные детекторы по мюонному фону. Это позволяет напрямую сравнить экспериментальные данные двух установок между собой. Для этого по СФПР мюонной компоненты в отобранных событиях были найдены плотности мюонов на расстоянии от оси 450 м ( $\rho_{MD}(450, 25.8^\circ)$ ). С помощью соотношений (2) и (3) они были приведены к величине  $\rho_{MD}(450, 35^\circ)$ , как в измерениях на установке Ожэ. Найденные таким образом плотности показаны на рис. 6, который представляет собой рис. 1 с наложенными данными Якутской установки. При  $E_0 \geq 8 \times 10^{17}$  эВ они согласуются с результатами расчетов, выполненных для детекторов установки Ожэ в рамках модели QGSJet-II.04 в случае первичных протонов, а при меньших энергиях указывают на смешанный состав первичных частиц.

Проблема аномально большого содержания мюонов в ШАЛ сверхвысоких энергий (см. например, [1–4, 11, 13]), о которой в последнее время много говорят, не является чисто мюонной. Во многих экспе-

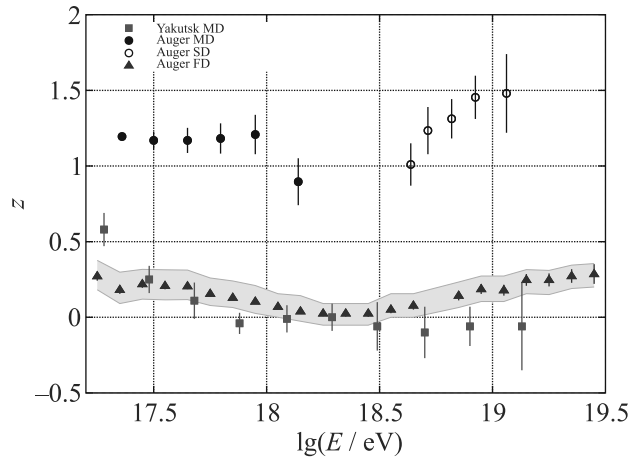


Рис. 5. (Цветной онлайн) Энергетические зависимости параметра  $z$  согласно разным видам измерений на Якутской установке и Обсерватории Ожэ, полученные в рамках модели QGSJet-II.04. Для Ожэ показаны значения по данным прямой регистрации мюонной компоненты ШАЛ (Auger MD), из анализа плотностей частиц на расстоянии 1000 м от оси, измеренной наземными детекторами (Auger SD) и оценки на основе прямых наблюдений глубины максимума развития ШАЛ оптическим методом (Auger FD). Серой полосой обозначены систематические погрешности оптических измерений Ожэ. Данные Якутской установки приведены в табл. 2 (Yakutsk MD)

риментах, где рассматриваются мюоны, они фактически нормируются на первичную энергию. В паре “мюоны–первичная энергия” последняя является самым слабым звеном. Это размерная величина: плотность мюонов, деленная на энергию [ $\text{м}^{-2}/\text{эВ}$ ]. Значение энергии прямо влияет на выводы (много или мало мюонов) по сравнению с другими экспериментами и модельными расчетами. Хотя число мюонов может быть нормальным.

В работе [22] сравниваются первичные энергетические спектры КЛ, полученные коллаборацией Ожэ и на Якутской установке. Согласие обоих спектров здесь вполне возможно, если, например, увеличить первичную энергию в эксперименте Ожэ в 1.25 раза. Тогда все плотности на рис. 6 после перенормировки данных Ожэ опустятся вниз на 25% (темные кружки). Полученные таким образом плотности мюонов могут вполне быть увязаны с тяжелым составом первичных частиц. В этом случае загадка мюонов (расхождение теории с экспериментом) теряет всю свою остроту и входит в русло конструктивного поиска причин остающихся здесь разногласий.

**4. Заключение.** Доля мюонов, полученная при совместном анализе плотностей  $\langle \rho_{MD}(600, 25.8^\circ) \rangle$  и

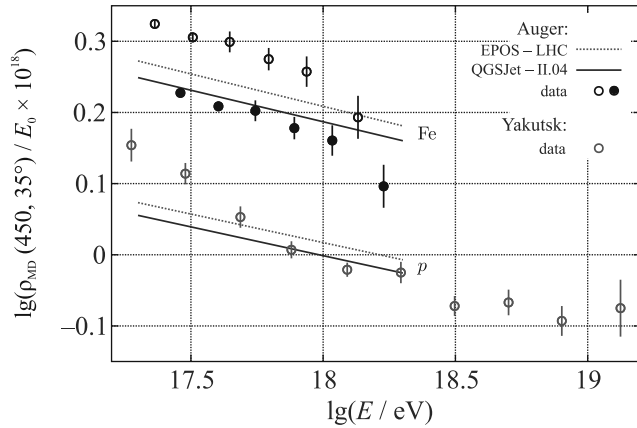


Рис. 6. (Цветной онлайн) Сравнение энергетических зависимостей параметра  $\rho_{MD}(450, 35^\circ)$ , полученных коллаборацией Ожэ (работа [11], рис. 11) и на Якутской установке. Средние плотности мюонов, полученные в якутском эксперименте, были приведены к зенитному углу  $\theta = 35^\circ$ . Линиями обозначены результаты расчетов, выполненных для мюонных детекторов установки Ожэ в рамках моделей адронных взаимодействий QGSJet-II.04 и EPOS-LHC для первичных протонов (p) и ядер железа (Fe). Символами обозначены экспериментальные данные. Темные кружки – перенормированные плотности мюонов после увеличения первичной энергии в эксперименте Ожэ в 1.25 раза

$\langle \rho_{SD}(600, 25.8^\circ) \rangle$  в общих выборках ливней с энергиями от  $2 \times 10^{17}$  до  $2 \times 10^{19}$  эВ, согласуются с ожидаемыми значениями, полученными в рамках моделей адронных взаимодействий QGSJet01, QGSJet-II.04 и EPOS-LHC (см. рис. 4). Сравнение этих данных с результатами коллаборации Ожэ [11] показало, что они явно противоречат друг другу (см. рис. 5 и 6). Кроме того, при более высоких энергиях результаты Якутской установки выглядят как “мюонный дефицит” по сравнению с моделями, особенно с EPOS-LHC (рис. 6), в противоположность обсуждаем другими экспериментами “мюонному избытку”. При  $E_0 \geq 8 \times 10^{17}$  эВ вполне допустима гипотеза о чисто протонном составе космических лучей. В области более низких энергий состав первичных частиц становится, по-видимому, смешанным, с добавкой более тяжелых ядер. Это согласуется с нашими более ранними оценками [12, 13, 24, 25]. В работе [11] обращает на себя внимание внутреннее противоречие результатов, которое, на наш взгляд, может быть связано с какими-то особенностями эксперимента Ожэ.

Очевидно, что вопрос измерений мюонной компоненты ШАЛ требует дальнейшего подробного изучения.

Работа выполнена в рамках государственного задания (номер госрегистрации 122011800084-7)

с использованием данных, полученных на Уникальной научной установке “Якутская комплексная установка широких атмосферных ливней (ЯКУ ШАЛ) им. Д. Д. Красильникова” (<https://ckp-rf.ru/catalog/usu/73611/>).

Авторы выражают благодарность сотрудникам Обособленного структурного подразделения ИКФИА СО РАН ЯКУ ШАЛ.

1. T. Abu-Zayyad, K. Belov, D. J. Bird et al. (HiRes-MIA Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **85** 4276 (2000); doi:10.1103/PhysRevLett.84.4276; arXiv:astro-ph/9911144.
2. H. P. Dembinski, J. C. Arteaga-Velázquez, L. Cazon et al. (for ES-MSU, IceCube, KASCADE-Grande, NEVOD-DECOR, Pierre Auger Observatory, SUGAR, Telescope Array and Yakutsk EAS Array collaborations); *EPJ Web Conf.* **210**, 02004 (2019); doi:10.1051/epjconf/201921002004.
3. A. Aab, P. Abreu, M. Aglietta et al. (The Pierre Auger Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **117**, 192001 (2016); doi:10.1103/PhysRevLett.117.192001; arXiv:1610.08509 [hep-ex].
4. R. U. Abbasi, M. Abe, T. Abu-Zayyad et al. (Telescope Array Collaboration), *Phys. Rev. D* **98**, 022002 (2018); doi:10.1103/PhysRevD.98.022002; arXiv:1804.03877 [astro-ph.HE].
5. N. N. Kalmykov, S. S. Ostapchenko, and A. I. Pavlov, *Nucl. Phys. B – Proc. Suppl.* **52**, 17 (1997); doi:10.1016/S0920-5632(96)00846-8.
6. S. Ostapchenko, *Phys. Rev. D* **83**, 014018 (2011); doi:10.1103/PhysRevD.83.014018; arXiv:1010.1869 [hep-ph].
7. T. Pierog, Iu. Karpenko, J. M. Katzy, E. Yatsenko, and K. Werner, *Phys. Rev. C* **92**, 034906 (2015); doi:10.1103/PhysRevC.92.034906; arXiv:1306.0121 [hep-ph].
8. A. V. Glushkov, K. G. Lebedev, and A. V. Saburov, *Bull. Russ. Acad. Sci.: Physics* **87**, in press (2023); arXiv:2301.12268 [astro-ph.HE].
9. А. В. Глушков, К. Г. Лебедев, А. В. Сабуров, *ЯФ* **86**, 379 (2023); arXiv:2304.08561 [astro-ph.HE].
10. А. В. Глушков, К. Г. Лебедев, А. В. Сабуров, *Письма в ЖЭТФ* **117**, 254 (2023).
11. A. Aab, P. Abreu, M. Aglietta et al. (The Pierre Auger Collaboration), *Eur. Phys. J. C* **80**, 751 (2020); doi:10.1140/epjc/s10052-020-8055-y.
12. А. В. Глушков, А. В. Сабуров, *Письма в ЖЭТФ* **109**, 579 (2019) [A. V. Glushkov and A. V. Saburov, *JETP Lett.* **109**, 559 (2019)]; doi:10.1134/S0370274X19090017.
13. А. В. Глушков, М. И. Правдин, А. В. Сабуров, *Письма в АЖ* **44**, 643 (2018) [M. I. Pravdin, A. V. Glushkov,

- and A. V. Saburov, *Astronomy Lett.* **44**, 588 (2018)]; doi:10.1134/S0320010818100029.
14. S. P. Knurenko and I. S. Petrov, *Adv. Space Res.* **64**, 2570 (2019); doi:10.1016/j.asr.2019.07.019; arXiv:1908.01508 [astro-ph.HE].
15. V. V. Prosin, S. F. Berezhnev, N. M. Budnev et al. (Tunka Collaboration), *EPJ Conf.* **121**, 03004 (2016); doi:10.1051/epjconf/201612103004.
16. R. U. Abbasi, M. Abe, T. Abu-Zayyad et al. (Telescope Array Collaboration), *APJ* **858**, 76 (2019); doi:10.3847/1538-4357/aabad7; arXiv:1801.09784 [astro-ph.HE].
17. A. V. Glushkov, M. I. Pravdin, and A. Sabourov, *Phys. Rev. D* **90**, 012005 (2014); doi:10.1103/PhysRevD.90.012005; arXiv:1408.6302 [astro-ph.HE].
18. А. В. Сабуров, *Пространственное распределение частиц ШАЛ с энергией выше  $10^{17}$  эВ по данным Якутской установки*. Дисс...канд. наук., ИЯИ РАН, М. (2018), 146 с.
19. D. Heck, J. Knapp, J. N. Capdevielle, G. Schatz, and T. Thouw, *CORSIKA: A Monte Carlo Code to Simulate Extensive Air Showers*; FZKA 6019, Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe (1988).
20. A. Ferrari, P. R. Sala, A. Fassò, and J. Ranft, *FLUKA: A multi-particle transport code (program version 2005)*, CERN-2005-010, CERN, Geneva (2005); doi:10.5170/CERN-2005-010.
21. W. R. Nelson, H. Hirayama, and D. W. O. Rogers, *The EGS4 code system*, SLAC-R-265, Stanford: SLAC (1985).
22. А. В. Глушков, М. И. Правдин, А. В. Сабуров, ЯФ **81**, 535 (2018) [A. V. Glushkov, M. I. Pravdin, and A. V. Saburov, *Phys. Atom. Nucl.* **81**, 575 (2018)]; doi:10.1134/S0044002718040049; arXiv:2301.09654 [astro-ph.HE].
23. B. Keilhauer, J. Bluemer, R. Engel, H. O. Klages, and M. Risse, *Astropart. Phys.* **22**, 249 (2004); doi:10.1016/j.astropartphys.2004.08.004; arXiv:astro-ph/0405048.
24. А. В. Глушков, А. В. Сабуров, *Письма в ЖЭТФ* **100**, 793 (2014) [A. V. Glushkov and A. V. Saburov, *JETP Lett.* **100**, 695 (2015)]; doi:10.1134/S0021364014230052.
25. А. В. Глушков, А. В. Сабуров, *ЖЭТФ* **146**, 968 (2014).

# О возможности преобразования с увеличением энергии линейно поляризованных аттосекундных импульсов высоких гармоник в циркулярно поляризованные в оптически модулированной неоподобной активной среде плазменного рентгеновского лазера

И. Р. Хайрулин<sup>+1)</sup>, В. А. Антонов<sup>+</sup>, М. Ю. Рябкин<sup>+\*</sup>

<sup>+</sup>Институт прикладной физики им. А. В. Гапонова-Грехова РАН, 603950 Н. Новгород, Россия

<sup>\*</sup>Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского, 603950 Н. Новгород, Россия

Поступила в редакцию 7 марта 2023 г.

После переработки 24 марта 2023 г.

Принята к публикации 27 марта 2023 г.

Предложен метод преобразования линейно поляризованного излучения одиночной гармоники или совокупности гармоник оптического поля высокого порядка, образующих последовательность субфемто-/аттосекундных импульсов, в эллиптически и, в частности, циркулярно поляризованное излучение в оптически модулированной неоподобной активной среде плазменного рентгеновского лазера. Показано, что данный метод позволяет обеспечить высокую энергетическую эффективность преобразования излучения благодаря усилению поля гармоник, а также является устойчивым к изменению числа высоких гармоник, образующих усиливаемые импульсы. Возможность экспериментальной реализации метода рассмотрена на примере активной плазмы неоподобных ионов  $Ti^{12+}$  с невозмущенной длиной волны инвертированного перехода 32.6 нм.

DOI: 10.31857/S1234567823090045, EDN: boldpr

**1. Введение.** Субфемто-/аттосекундные импульсы вакуумного ультрафиолетового (ВУФ) и рентгеновского излучения являются мощным инструментом исследования и управления динамикой электронных процессов, протекающих в атомах, молекулах и твердых телах на их собственных (фемто- и аттосекундных) временных масштабах [1–4]. Основным способом получения таких импульсов на сегодняшний день является генерация гармоник оптического/инфракрасного (ИК) поля высокого порядка (ГВП) [5–7] посредством фокусировки лазерного импульса с интенсивностью порядка  $10^{14}$ – $10^{15}$  Вт/см<sup>2</sup> в струю газа благородных атомов. В этом случае, согласно трехступенчатой модели ГВП [8, 9], под действием лазерного поля происходит ионизация атомов газа, ускорение оторванных электронов под действием лазерного поля и с определенной вероятностью их столкновение с родительскими ионами, в результате которого набранная кинетическая энергия преобразуется в высокочастотное излучение. Наиболее эффективно такой процесс протекает в лазерном поле линейной поляризации, так как вероятность столкновения

электрона с ионом оказывается наибольшей [10, 11]. В этом случае поляризация генерируемых высоких гармоник оказывается также линейной.

В то же время, для исследования магнитных и хиральных сред, обладающих свойством кругового дихроизма, наиболее ярко проявляющимся на краях полос поглощения веществ, требуется излучение ВУФ/рентгеновского диапазона циркулярной поляризации [12–14]. До недавнего времени основными источниками такого излучения были синхротроны. Однако использование синхротронных источников для измерений сверхбыстрых физических и химических процессов ограничено пикосекундной длительностью (10–100 пс) и недостаточной интенсивностью генерируемых импульсов. В качестве альтернативы в последнее время для этих целей все чаще используют гораздо более яркие фемтосекундные источники на основе рентгеновских лазеров на свободных электронах (ЛСЭ) со специально сконструированными ондуляторами [15–17], позволяющими получить излучение с высокой эллиптичностью. Однако, в силу того, что генерация в ЛСЭ стартует со спонтанных процессов, генерируемое в ондуляторе ЛСЭ излучение обладает низкой продольной когерентностью, и его спектрально-временные харак-

<sup>1)</sup>e-mail: khairulnir@ipfran.ru

теристики существенно изменяются от импульса к импульсу. В последнее время активно развивается подход, основанный на использовании усиления когерентного затравочного излучения [18]. Однако его расширение на случай субфемтосекундных (тем более, циркулярно-поляризованных) импульсов остается проблематичным. Кроме того, огромные размеры и стоимость подобных экспериментальных комплексов и, как следствие, их недоступность для широкого круга исследователей делают привлекательной идею получения эллиптически/циркулярно поляризованного ВУФ/рентгеновского излучения с помощью лабораторных источников, основанных на эффекте ГГВП.

Получение интенсивного излучения высоких гармоник эллиптической и циркулярной поляризации является значительно более трудной задачей по сравнению с генерацией гармоник линейной поляризации. Одним из возможных способов решения этой задачи является использование ГГВП в лазерном поле эллиптической поляризации [19]. Однако вероятность рекомбинации оторванного электрона с родительским ионом быстро спадает с ростом эллиптичности лазерного поля [10], так как при движении в эллиптически поляризованном поле электрон с большой вероятностью пролетает мимо родительского иона, что делает данный метод неэффективным для генерации излучения гармоник с высокой эллиптичностью. Одним из способов преодолеть данное ограничение является использование газа выстроенных молекул, где цилиндрическая симметрия относительно оси поляризации лазерного поля оказывается нарушенной, что позволяет генерировать эллиптически поляризованные гармоники при использовании лазерного поля линейной поляризации [20, 21]. Кроме того, в последнее время большое внимание уделяется методам генерации высоких гармоник эллиптической и циркулярной поляризации, основанным на использовании многокомпонентных лазерных полей с различающимися частотами, амплитудами и, в общем случае, поляризациями. К примеру, в работах [22, 23] экспериментально показана возможность генерации гармоник с эллиптичностью 0.7–0.75 в благородных газах в комбинации перекрывающихся лазерных импульсов на фундаментальной частоте и ее второй гармонике с взаимно ортогональными линейными поляризациями, а в работах [24, 25] использовались так называемые биэллиптические или бициркулярные поля, в которых два лазерных пучка с отношением частот 1:2 обладают эллиптически или циркулярными поляризациями, вектора электрического поля в которых вращаются в противополо-

жных направлениях. В то же время, следует отметить, что излучение гармоник, генерируемых в многокомпонентных лазерных полях, зачастую обладает неоднородным спектральным и поляризационным составом: гармоники близких порядков обладают существенно различающимися амплитудами, фазами и/или поляризацией.

Низкая эффективность генерации высоких гармоник эллиптической и циркулярной поляризации делает актуальной задачу их усиления. В недавней работе [26] была экспериментально показана возможность усиления циркулярно поляризованного излучения одиночной гармоники высокого порядка, настроенной в резонанс с инвертированным переходом никелеподобных ионов  $Kr^{8+}$  в активной среде плазменного рентгеновского лазера. При этом усиление достигалось с сохранением поляризационного состояния излучения. Более того, в работе [27] была теоретически показана возможность усиления совокупности высоких гармоник, образующих последовательность субфемто-/аттосекундных импульсов циркулярной или эллиптической поляризации, в активной среде неоподобных ионов  $Ti^{12+}$ , дополнительно облучаемой интенсивным лазерным полем фундаментальной частоты. Роль данного поля состоит в модуляции энергий лазерных состояний ионов (верхнего и нижних состояний инвертированного перехода) посредством эффекта Штарка и, как следствие, в перераспределении спектра усиления среды по комбинационным частотам в окрестности частоты резонанса. При этом вследствие наведенной модулирующим полем анизотропии среды поляризационные составляющие поля гармоник, параллельная и ортогональная к поляризации модулирующего поля, усиливаются по-разному. При определенной комбинации интенсивности и длины волны модулирующего поля многокомпонентные спектры усиления обеих поляризационных составляющих точно согласованы между собой. В результате усиление совокупности гармоник оказывается возможным как с сохранением поляризационного состояния, так и с умеренным (не более, чем в несколько раз) увеличением эллиптичности излучения. Рост эллиптичности поля гармоник в последнем случае достигается за счет преимущественного усиления одной из поляризационных компонент, в то время как разность фаз между ними остается неизменной и в случае эллиптической или циркулярной поляризации составляет  $\pi/2$ .

Альтернативным способом получения эллиптически или циркулярно поляризованного излучения высоких гармоник является генерация гармоник линейной поляризации при облучении газовой среды ли-



нейно поляризованным лазерным полем с последующим преобразованием их поляризации в эллиптическую или циркулярную. В диапазоне ВУФ и рентгеновского излучения для этого, в основном, используются многослойные структуры, при прохождении через которые или при отражении от которых между двумя ортогональными (*s*- и *p*-) поляризационными компонентами поля набегают разность фаз  $\pi/2$  [28]. Первоначально такие структуры применялись для преобразования и анализа поляризации излучения синхротронных источников [29, 30], но в недавних работах была показана возможность их использования для преобразования линейно поляризованного излучения высоких гармоник в циркулярно поляризованное [31,32]. Однако существенным недостатком таких схем является низкая эффективность преобразования (по энергии излучения), которая составляет в лучшем случае несколько процентов.

В настоящей работе мы предлагаем метод преобразования линейной поляризации в эллиптическую с управляемой степенью эллиптичности и, в частности, в циркулярную, для излучения как одиночной гармоники, так и совокупности высоких гармоник, образующих субфемто-/аттосекундные импульсы, с одновременным усилением излучения. С этой целью предлагается внести небольшую (порядка ширины линий усиления) частотную расстройку между линиями усиления для ортогональных поляризационных компонент поля гармоник посредством соответствующего выбора интенсивности модулирующего поля. Как следствие, в спектре усиления появляются области, где одна поляризационная компонента поля при распространении в среде приобретает положительный фазовый сдвиг, а другая – отрицательный. В результате при настройке частот гармоник между индуцированными линиями усиления на оптимальной толщине среды между поляризационными составляющими излучения достигается фазовый сдвиг  $\pi/2$ , что, в зависимости от взаимной ориентации поляризацй модулирующего поля и поля гармоник на входе в среду, соответствует преобразованию поляризации гармоник в эллиптическую или циркулярную. Отметим, что фазовое преобразование поля гармоник позволяет увеличить эллиптичность в неограниченное число раз (в том числе, от 0 до 1). Возможность реализации предлагаемого метода обсуждается на примере активной плазмы неоподобных ионов  $\text{Ti}^{12+}$  с невозмущенной длиной волны инвертированного перехода 32.6 нм.

**2. Теоретическая модель.** Рассмотрим активную среду плазменного рентгеновского лазера с инверсией населенности на переходе между двумя воз-

бужденными энергетическими уровнями неоподобных ионов  $\text{Ti}^{12+}$   $|3p^1S_0\rangle \leftrightarrow |3s^1P_1\rangle$  с невозмущенной длиной волны перехода 32.6 нм [33, 34] (рис. 1а). Верхний энергетический уровень является невырожденным и соответствует состоянию  $|1\rangle = |3p^1S_0, J = 0, M = 0\rangle$  с полным моментом  $J = 0$ . Нижний энергетический уровень является трехкратно вырожденным и соответствует состояниям  $|2\rangle = |3s^1P_1, J = 1, M = 0\rangle$ ,  $|3\rangle = |3s^1P_1, J = 1, M = 1\rangle$ ,  $|4\rangle = |3s^1P_1, J = 1, M = -1\rangle$  с полным моментом  $J = 1$  и различными проекциями момента на ось квантования,  $M = 0, \pm 1$ . Далее, будем полагать, что активная плазменная среда имеет форму тонкого вытянутого вдоль оси *x* цилиндра, в котором концентрация ионов  $\text{Ti}^{12+}$  и свободных электронов, аналогично [27], составляют  $N_{\text{ion}} = 4.2 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$  и  $N_e = 5 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$ , соответственно. Важно отметить, что лишь около 1% ионов находятся в верхнем состоянии  $|1\rangle$ , тогда как нижние лазерные состояния  $|2\rangle$ ,  $|3\rangle$ ,  $|4\rangle$  практически не заселены из-за быстрых излучательных переходов в нижележащие состояния ионов  $\text{Ti}^{12+}$ . В результате коэффициент усиления активной среды по интенсивности составляет  $70 \text{ см}^{-1}$ .

Далее будем полагать, что активная плазменная среда одновременно облучается двумя линейно поляризованными полями, которые распространяются вдоль оси *x* плазменного канала (рис. 1). Первым из них является достаточно длинный по сравнению с временными масштабами описываемых процессов импульс лазерного поля ИК диапазона с частотой  $\Omega$  и амплитудой  $E_{IR}$ , однородной во всем объеме активной среды. Подобный лазерный импульс можно представить в виде плоской монохроматической волны, электрическое поле которой имеет вид:

$$\mathbf{E}_{IR}(x, t) = \mathbf{z}_0 E_{IR} \cos \left[ \Omega \left( t - x \sqrt{\varepsilon_{pl}^{(IR)}} / c \right) \right], \quad (1)$$

где  $\mathbf{z}_0$  – единичный вектор поляризации лазерного поля (далее ось *z* будет выбрана в качестве оси квантования),  $c$  – скорость света в вакууме,  $\varepsilon_{pl}^{(IR)} = 1 - \omega_{pl}^2 / \Omega^2$  – диэлектрическая проницаемость плазмы на частоте ИК поля,  $\omega_{pl} = \sqrt{4\pi N_e e^2 / m_e}$  – плазменная частота,  $e$  и  $m_e$  – заряд и масса электрона, соответственно. В выражении (1) значения  $\Omega$  и  $E_{IR}$  таковы, что частота ИК поля и частоты Раби на всех разрешенных переходах из состояний  $|1\rangle - |4\rangle$  много меньше частот этих переходов. Таким образом, влияние поля (1), в основном, сводится к изменению мгновенных значений энергии состояний  $|1\rangle - |4\rangle$  на масштабе в доли оптического периода и длины волны вследствие квадратичного эффекта Штарка [35]. При этом частоты переходов между состояниями

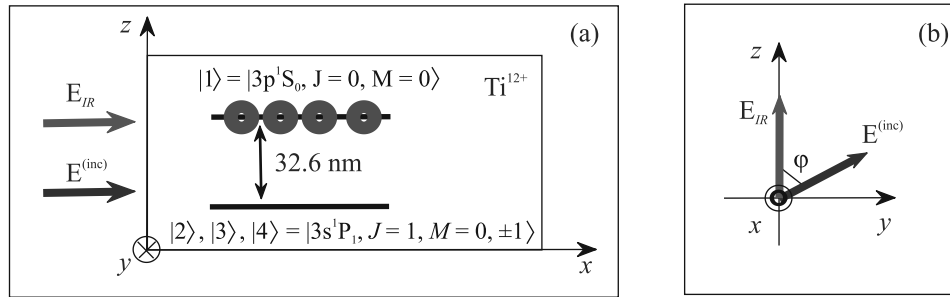


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Схематичное пояснение рассматриваемой постановки задачи. Активная среда плазменного рентгеновского лазера на основе неоноподобных ионов  $\text{Ti}^{12+}$  в виде вытянутого вдоль оси  $x$  цилиндра облучается комбинацией линейно поляризованного лазерного поля ИК диапазона (красная стрелка) и совокупностью линейно поляризованных высоких гармоник различных порядков, образующих последовательность субфемто-/аттосекундных импульсов (синяя стрелка), с частотами, близкими к частоте инвертированного перехода. (б) – Направления поляризации ИК поля (красная стрелка) и суммарного поля высоких гармоник (синяя стрелка)

ми  $|1\rangle - |4\rangle$  изменяются во времени и пространстве вслед за изменением интенсивности лазерного поля (1):

$$\begin{aligned} \omega_{12}(t, x) &= \bar{\omega}_z + \Delta_z \cos \left[ 2\Omega \left( t - x \sqrt{\varepsilon_{pl}^{(IR)}} / c \right) \right], \\ \omega_{13}(t, x) &= \omega_{14}(t, x) = \\ &= \bar{\omega}_y + \Delta_y \cos \left[ 2\Omega \left( t - x \sqrt{\varepsilon_{pl}^{(IR)}} / c \right) \right], \quad (2) \\ \omega_{23}(t, x) &= \omega_{24}(t, x) = \\ &= (\Delta_z - \Delta_y) \left\{ 1 + \cos \left[ 2\Omega \left( t - x \sqrt{\varepsilon_{pl}^{(IR)}} / c \right) \right] \right\}, \\ \omega_{34}(t, x) &= 0, \end{aligned}$$

где  $\Delta_z \equiv \Delta_{12}$ ,  $\Delta_y \equiv \Delta_{13} = \Delta_{14}$ ,  $\Delta_{ij} = \sum_{k \neq i} (|d_{ki}^{(z)}| E_{IR})^2 / (2\hbar^2 \omega_{ik}) - \sum_{k \neq j} (|d_{kj}^{(z)}| E_{IR})^2 / (2\hbar^2 \omega_{jk})$  – амплитуда модуляции частоты перехода  $|i\rangle \rightarrow |j\rangle$ ,  $d_{ki}^{(z)}$  –  $z$ -проекция дипольного момента перехода из состояния  $|i\rangle$  в состояние  $|k\rangle$  с частотой  $\omega_{ik}$ ,  $\hbar$  – приведенная постоянная Планка, а суммирование ведется по всем состояниям иона  $\text{Ti}^{12+}$  в отсутствие поля (1). Также в (2)  $\bar{\omega}_z \equiv \bar{\omega}_{12} = \omega_{12}^{(0)} + \Delta_z$  – средняя по времени частота перехода  $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$ . В отсутствие ИК поля  $\bar{\omega}_{12}$  совпадает с невозмущенной частотой перехода  $\omega_{12}^{(0)}$ . Аналогично,  $\bar{\omega}_y \equiv \bar{\omega}_{13} = \omega_{13}^{(0)} + \Delta_y = \bar{\omega}_{14} = \omega_{14}^{(0)} + \Delta_y$  – средняя по времени частота переходов  $|1\rangle \rightarrow |3\rangle$  и  $|1\rangle \rightarrow |4\rangle$ , причем в отсутствие модулирующего поля  $\omega_{12}^{(0)} = \omega_{13}^{(0)} = \omega_{14}^{(0)}$ . Отметим, что для неоноподобных ионов амплитуды модуляции переходов  $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$  и  $|1\rangle \rightarrow |3\rangle, |4\rangle$  несколько отличаются друг

от друга. К примеру, для неоноподобных ионов  $\text{Ti}^{12+}$   $|\Delta_z|/|\Delta_y| \approx 0.93$  [27]. Как следствие, средние по времени частоты соответствующих переходов оказываются разными.

Одновременно активная среда облучается совокупностью  $2N + 1$  линейно поляризованных в плоскости  $zy$  гармоник ИК поля фундаментальной частоты  $\Omega$  высокого порядка с одинаковыми амплитудами  $A_0$  и одинаковыми фазами. Во временной области излучение гармоник образует последовательность субфемто-/аттосекундных импульсов, электрическое поле которых имеет вид:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^{(inc)}(t) &= \frac{1}{2} \exp(-i\omega_{inc}t) \sum_{n=-N}^N a(t) [z_0 A \cos(\varphi) + \\ &+ y_0 A \sin(\varphi)] e^{-i2n\Omega t} + \text{к.с.}, \quad (3) \end{aligned}$$

где  $\omega_{inc}$  – несущая частота поля (3),  $\varphi$  – угол между направлениями поляризации поля высоких гармоник и лазерного поля (1) (рис. 1б), а  $a(t)$  – огибающая (по полю) импульсной последовательности, которая определяется формой спектрального контура отдельной гармоники. Если несущая частота  $\omega_{inc}$  поля (3) близка к средним частотам  $\bar{\omega}_{12}$  и  $\bar{\omega}_{13}$ , то при распространении в среде оно (поле) может приводить к возбуждению резонансной поляризации. При этом в силу того, что дипольный момент перехода  $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$  ориентирован вдоль оси  $z$ , а дипольные моменты переходов  $|1\rangle \rightarrow |3\rangle, |4\rangle$  лежат в плоскости  $xy$ ,  $z$ -проекция поля (3) будет отвечать за возбуждение  $z$ -проекции вектора резонансной поляризации среды посредством возбуждения квантовой когерентности (недиагонального элемента матрицы плотности) на переходе  $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$ ,  $\rho_{12}$ . Аналогично,  $y$ -проекция поля (3) будет приводить к возбуждению

$y$ -проекции вектора резонансной поляризации среды посредством возбуждения когерентностей на переходах  $|1\rangle \rightarrow |3\rangle, |4\rangle$ ,  $\rho_{13}$  и  $\rho_{14}$ :

$$\mathbf{P}(x, t) = N_{\text{ion}}^{(\text{res})}(\rho_{12}\mathbf{d}_{21} + \rho_{13}\mathbf{d}_{31} + \rho_{14}\mathbf{d}_{41}) + \text{к.с.}, \quad (4)$$

где  $N_{\text{ion}}^{(\text{res})}$  – концентрация ионов  $\text{Ti}^{12+}$ , которые к моменту прихода излучения высоких гармоник (3) находятся в одном из резонансных состояний  $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$  или  $|4\rangle$ ;  $\mathbf{d}_{21} = z_0 d_z$ ,  $\mathbf{d}_{31} = \mathbf{d}_{41} = -iy_0 d_y$ ,  $d_z = D/\sqrt{3}$ ,  $d_y = D/\sqrt{6}$ , а  $D \equiv |\langle 3p^1 S_0 \| D \| 3s^1 P_1 \rangle| \simeq 0.41$  ат.ед. – приведенный дипольный момент инвертированного перехода. Ниже, для удобства, переход  $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$  будем называть  $z$ -поляризованным, а переходы  $|1\rangle \rightarrow |3\rangle, |4\rangle$  –  $y$ -поляризованными.

Далее распространение излучения высоких гармоник (3) в модулированной оптическим полем неоподобной активной плазменной среде описывается замкнутой системой уравнений, состоящей из одномерного волнового уравнения и уравнений для элементов матрицы плотности состояний  $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$  и  $|4\rangle$ , частоты переходов между которыми изменяются согласно выражениям (2). Явный вид этой системы уравнений в приближении медленно меняющихся амплитуд и приближении вращающейся волны приведен в работе [27]. При этом, как показано в [27], взаимодействие высокочастотного излучения (3) (при реалистичных значениях его интенсивности) с модулированной активной средой происходит в режиме, близком к линейному, когда изменением разности населенностей на  $z$ - и  $y$ -поляризованных переходах можно пренебречь. В этом случае  $z$ - и  $y$ -компоненты поля высоких гармоник распространяются в среде независимо друг от друга, и их пространственно-временная эволюция описывается двумя независимыми системами уравнений:

$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{E}_z}{\partial x} = i4\pi N_{\text{ion}}^{(\text{res})} d_z \frac{\omega_{\text{inc}}}{c\sqrt{\varepsilon_{pl}^{(HH)}}} \tilde{\rho}_{12}, \\ \frac{\partial \tilde{\rho}_{12}}{\partial \tau} + \{i(\tilde{\omega}_z - \omega_{\text{inc}}) + \\ + i\Delta_z \cos[2(\Omega\tau + \Delta Kx)] + \gamma_{12}\} \tilde{\rho}_{12} = \\ = -in_{tr}^{(z)} \frac{d_z \tilde{E}_z}{2\hbar}, \end{cases} \quad (5a)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{E}_y}{\partial y} = 4\pi N_{\text{ion}}^{(\text{res})} d_y \frac{\omega_{\text{inc}}}{c\sqrt{\varepsilon_{pl}^{(HH)}}} (\tilde{\rho}_{13} + \tilde{\rho}_{14}), \\ \frac{\partial \tilde{\rho}_{13}}{\partial \tau} + \{i(\tilde{\omega}_y - \omega_{\text{inc}}) + \\ + i\Delta_y \cos[2(\Omega\tau + \Delta Kx)] + \gamma_{13}\} \tilde{\rho}_{13} = \\ = \frac{n_{tr}^{(y)} d_y}{2\hbar} \tilde{E}_y, \frac{\partial \tilde{\rho}_{14}}{\partial \tau} + \{i(\tilde{\omega}_y - \omega_{\text{inc}}) + \\ + i\Delta_y \cos[2(\Omega\tau + \Delta Kx)] + \gamma_{14}\} \tilde{\rho}_{14} = \\ = \frac{n_{tr}^{(y)} d_y}{2\hbar} \tilde{E}_y, \end{cases} \quad (5b)$$

где  $\tau = t - x\sqrt{\varepsilon_{pl}^{(HH)}}/c$  – локальное время в системе отсчета, движущейся вдоль оси  $x$  с фазовой скоростью излучения высоких гармоник в плазме,  $\varepsilon_{pl}^{(HH)} = 1 - \omega_{pl}^2/\omega_{\text{inc}}^2$ ,  $\tilde{E}_z(x, \tau)$  и  $\tilde{E}_y(x, \tau)$  – медленно меняющиеся амплитуды  $z$ - и  $y$ -поляризованных компонент высокочастотного поля, соответственно,  $\tilde{\rho}_{12}(x, \tau)$ ,  $\tilde{\rho}_{13}(x, \tau)$  и  $\tilde{\rho}_{14}(x, \tau)$  – медленно меняющиеся амплитуды когерентностей на переходах  $|1\rangle \rightarrow |2\rangle, |3\rangle, |4\rangle$ ,  $n_{tr}^{(z)} \equiv n_{tr}^{(12)}$ ,  $n_{tr}^{(y)} \equiv n_{tr}^{(13)} = n_{tr}^{(14)}$  – соответствующие разности населенностей, которые в рассматриваемом приближении одинаковы и равны  $n_{tr}^{(z)} \equiv n_{tr}^{(y)} = 1$ ;  $\Delta K = \Omega \left( \sqrt{\varepsilon_{pl}^{(HH)}} - \sqrt{\varepsilon_{pl}^{(IR)}} \right) / c$  – добавка к волновому числу модулирующего ИК поля (1), обусловленная разностью фазовых скоростей излучения высоких гармоник и лазерного поля фундаментальной частоты в плазме;  $\gamma_{12} = \gamma_{12}^{(0)} + (w_{\text{ion}}^{(1)} + w_{\text{ion}}^{(2)})/2$ ,  $\gamma_{13} = \gamma_{13}^{(0)} + (w_{\text{ion}}^{(1)} + w_{\text{ion}}^{(3)})/2$ ,  $\gamma_{14} = \gamma_{14}^{(0)} + (w_{\text{ion}}^{(1)} + w_{\text{ion}}^{(4)})/2$  – скорости релаксации когерентностей на переходах  $|1\rangle \rightarrow |2\rangle, |3\rangle, |4\rangle$ ;  $\gamma_{12}^{(0)} = \gamma_{13}^{(0)} = \gamma_{14}^{(0)} = \gamma_{\text{coll}} + (\Gamma_{\text{rad}}^{(1)} + \Gamma_{\text{rad}}^{(2,3,4)})/2$  – аналогичные скорости релаксации, но в отсутствие модулирующего поля,  $\Gamma_{\text{rad}}^{(i)}$  – скорость радиационного распада состояния  $|i\rangle$  во все нижележащие состояния иона ( $\Gamma_{\text{rad}}^{(1)-1} \simeq 50$  пс,  $\Gamma_{\text{rad}}^{(2,3,4)-1} \simeq 3.3$  пс),  $\gamma_{\text{coll}}$  – скорость столкновительной релаксации, величина которой определялась по экспериментально измеренной относительной ширине линии усиления оптически тонкой среды; для активной плазмы ионов  $\text{Ti}^{12+}$   $\gamma_{\text{coll}}^{-1} \simeq 220$  фс ( $2\gamma_{12}^{(0)}/\omega_{12}^{(0)} \simeq 1.5 \cdot 10^{-4}$  [27]);  $w_{\text{ion}}^{(i)}$  – скорость туннельной ионизации из состояния  $|i\rangle$  ( $i = 1, 2, 3, 4$ ) под действием ИК поля, которая оценивалась по теории Переломова–Попова–Терентьева [36]. Отметим, что при рассматриваемых ниже параметрах модулирующего ИК поля скорости ионизации  $w_{\text{ion}}^{(i)}$  оказываются много меньше невозмущенных скоростей релаксации когерентностей на рассматриваемых переходах, из-за чего справедливо равенство:  $\gamma_{12} \approx \gamma_{13} \approx \gamma_{14} \equiv \gamma$ .

Решения систем (5a) и (5b) для медленно меняющихся амплитуд  $\tilde{E}_z$  и  $\tilde{E}_y$  имеют вид:

$$\begin{aligned} \tilde{E}_z(x, \tau) &= \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{S}_{\text{inc}}^{(z)}(\omega) \exp[\tilde{G}_z(\omega)x] e^{-i\omega\tau} d\omega, \\ \tilde{G}_z(\omega) &= \sum_{n_z=-\infty}^{\infty} \frac{g_0 J_{n_z}^2(P_{\Omega}^{(z)})}{1 + i(\tilde{\omega}_z + 2n_z\Omega - \omega - \omega_{\text{inc}})/\gamma}, \quad (6a) \\ \tilde{E}_y(x, \tau) &= \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{S}_{\text{inc}}^{(y)}(\omega) \exp[\tilde{G}_y(\omega)x] e^{-i\omega\tau} d\omega, \end{aligned}$$

$$\tilde{G}_y(\omega) = \sum_{n_y=-\infty}^{\infty} \frac{g_0 J_{n_y}^2(P_{\Omega}^{(y)})}{1 + i(\bar{\omega}_y + 2n_y\Omega - \omega - \omega_{\text{inc}})/\gamma}, \quad (6b)$$

где  $\tilde{S}_{\text{inc}}^{(z,y)}(\omega)$  – спектры  $z$ - и  $y$ -компонент высокочастотного поля на передней границе среды ( $x = 0$ ) (отметим, что в силу отсутствия отражений данное поле совпадает с полем (3)),  $P_{\Omega}^{(z,y)} = \Delta_{z,y}/(2\Omega)$  – индексы модуляции для  $z$ - и  $y$ -поляризованных переходов,  $J_n(x)$  – функция Бесселя первого рода  $n$ -го порядка,  $g_0 = 2\pi\omega_{\text{inc}}N_{\text{ion}}^{(\text{res})}n_{tr}^{(z)}d_z^2/(\hbar c\gamma\sqrt{\varepsilon_{pl}^{(HH)}}) = 4\pi\omega_{\text{inc}}N_{\text{ion}}^{(\text{res})}n_{tr}^{(y)}d_y^2/(\hbar c\gamma\sqrt{\varepsilon_{pl}^{(HH)}})$  – коэффициент усиления по амплитуде в отсутствие модулирующего поля, который для рассматриваемой активной среды ионов  $\text{Ti}^{12+}$  составляет  $g_0 = 35 \text{ см}^{-1}$ . При выводе формул (6) (подробный вывод аналогичного выражения приведен в работе [37]) дополнительно предполагалось, что начальные значения когерентностей  $\tilde{\rho}_{12}$ ,  $\tilde{\rho}_{13}$  и  $\tilde{\rho}_{14}$  равны нулю, что равносильно пренебрежению влиянием усиленного спонтанного излучения. Кроме того, выражения (6) подразумевают, что плазма является сильно диспергирующей для модулирующего ИК поля, так что выполняется неравенство  $g_0/\Delta K \ll 1$  (для рассматриваемых ниже параметров модулирующего поля  $g_0/\Delta K \simeq 0.005$ ), и, как следствие, эффекты когерентного рассеяния частотных компонент высокочастотного поля [38–42] несущественны.

Для описания состояния поляризации высокочастотного излучения высоких гармоник будем использовать величину эллиптичности [43]

$$\sigma = \text{tg}(\chi), \quad (7a)$$

где угол  $\chi$  определяется выражением

$$\sin(2\chi) = \frac{2|\tilde{E}_z| \cdot |\tilde{E}_y| \sin(\delta)}{|\tilde{E}_z|^2 + |\tilde{E}_y|^2}, \quad (7b)$$

а  $\delta \equiv \arg(\tilde{E}_z) - \arg(\tilde{E}_y)$  – разность фаз между медленно меняющимися амплитудами  $z$ - и  $y$ -поляризационных компонент высокочастотного поля.

Согласно решению (6) спектры усиления для  $z$ - и  $y$ -компонент высокочастотного поля,  $\tilde{G}_{z,y}(\omega)$ , представляют собой набор индуцированных линий усиления, отстоящих друг от друга на удвоенную частоту модулирующего поля и центрированных относительно средних частот  $z$ - и  $y$ -поляризованных переходов, соответственно, а соответствующие коэффициенты усиления отличаются от невозмущенного коэффициента усиления в  $J_{n_z}^2(P_{\Omega}^{(z)})$  и  $J_{n_y}^2(P_{\Omega}^{(y)})$  раз. При этом в

силу того, что частота модулирующего поля  $\Omega$  существенно превышает скорость релаксации когерентности  $\gamma$ , которая, в свою очередь, определяет полуширину линий усиления (для ионов  $\text{Ti}^{12+}$  и модулирующего поля с длиной волны  $3.9 \text{ мкм}$   $\Omega/\gamma \approx 105$ ), индуцированные линии усиления с различными номерами  $n_{z,y}$  в общем случае не перекрываются.

**3. Условия преобразования линейной поляризации в циркулярную для излучения высоких гармоник.** Пусть интенсивность и длина волны модулирующего поля подобраны так, что выполняется следующее равенство:

$$\bar{\omega}_y - \bar{\omega}_z = \Delta_y - \Delta_z = 2\Omega + \Delta\omega_{yz}, \quad (8)$$

где  $0 \leq \Delta\omega_{yz} < 2\Omega$ . Тогда, если  $\Delta\omega_{yz} = 0$ , то спектр усиления для  $y$ -поляризованной составляющей высокочастотного поля,  $\tilde{G}_y(\omega)$ , будет смещен как целое относительно спектра усиления для  $z$ -поляризованной составляющей,  $\tilde{G}_z(\omega)$ , на удвоенную частоту модулирующего поля, и они будут полностью перекрываться. При этом линия усиления с номером  $n_z = n$  и коэффициентом усиления  $J_n^2(P_{\Omega}^{(z)})$  для поля  $z$ -поляризации будет совпадать с линией усиления с номером  $n_y = n - 1$  и коэффициентом усиления  $J_{n-1}^2(P_{\Omega}^{(y)})$  для поля  $y$ -поляризации, а соответствующие индексы модуляции будут связаны соотношением:  $P_{\Omega}^{(y)} - P_{\Omega}^{(z)} = 1$ . Если же величина  $\Delta\omega_{yz} > 0$  оказывается порядка ширины линии усиления активной среды,  $2\gamma$ , то между  $n$ -й линией усиления  $z$ -поляризации и  $(n - 1)$ -й линией усиления  $y$ -поляризации появляется спектральное окно, в котором резонансная дисперсия для  $z$ -поляризованной составляющей поля является положительной, а для  $y$ -поляризованной составляющей – отрицательной. В результате существует зависящее от величины отношения  $J_n^2(P_{\Omega}^{(z)})/J_{n-1}^2(P_{\Omega}^{(y)})$  оптимальное положение частоты высокой гармоники между соответствующими линиями усиления, а также оптимальная ориентация поляризации поля гармоники относительно поляризации модулирующего поля, определяемая углом  $\varphi$ , так что на определенной толщине активной среды амплитуды  $z$ - и  $y$ -поляризационных составляющих высокой гармоники будут близки друг к другу, а разность фаз между ними будет равна  $\pi/2$ . Другими словами, поляризация поля гармоники изменится с линейной на циркулярную. Важно отметить, что эффективность (по энергии поля) такого преобразования оказывается выше 100%, так как при распространении в среде излучение усиливается.

На рисунке 2а представлены спектры усиления для высокочастотного поля  $z$ - и  $y$ -поляризации в оптически модулированной активной плазме нео-

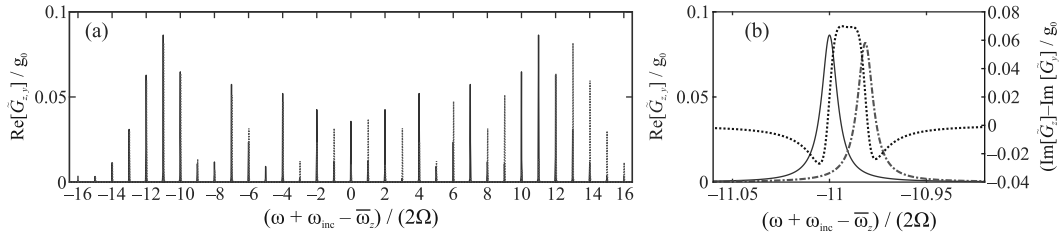


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Спектры усиления оптически модулированной активной плазменной среды неоподобных ионов  $\text{Ti}^{12+}$  для  $z$  – (синяя сплошная линия) и  $y$  – (красная штриховая линия) поляризованных составляющих высокочастотного поля. (б) – По левой оси – тот же спектр, что и на рисунке (а), только в окрестности линий усиления с  $n = -11$ ; по правой оси – разность дисперсионных зависимостей, относящихся к линиям усиления  $z$ - и  $y$ -поляризации (черная пунктирная линия). Оба рисунка построены при выполнении равенства (8) и  $\Delta\omega_{yz} = 3.8\gamma$ ,  $\Omega/\gamma \approx 105$  ( $\Lambda = 2\pi c/\Omega = 3.9$  мкм,  $I_{IR} = 8.45 \times 10^{16}$  Вт/см<sup>2</sup>). Соответствующие значения индексов модуляции:  $P_{\Omega}^{(z)} \approx 12.80$  и  $P_{\Omega}^{(y)} \approx 13.82$

ноподобных ионов  $\text{Ti}^{12+}$  при выполнении условия (8) и частотном сдвиге между спектрами усиления  $\Delta\omega_{yz} = 3.8\gamma$ . В этом случае индексы модуляции для  $z$ - и  $y$ -поляризованных переходов составляют  $P_{\Omega}^{(z)} \approx 12.80$  и  $P_{\Omega}^{(y)} \approx 13.82$ , соответственно. Отметим, что для получения таких индексов модуляции может быть использована следующая комбинация интенсивности и длины волны модулирующего поля:  $I_{IR} = 8.45 \times 10^{16}$  Вт/см<sup>2</sup> и  $\Lambda = 2\pi c/\Omega \approx 3.9$  мкм, которая является экспериментально достижимой [44, 45]. На рисунке 2а можно выделить две характерные спектральные области. Первая из них соответствует спектральному интервалу  $-15 \leq (\omega - \omega_{inc} - \bar{\omega}_z)/(2\Omega) \leq -6$  (что соответствует  $-15 \leq n \leq -6$ ), в котором коэффициенты усиления для  $z$ - и  $y$ -поляризованных компонент поля близки друг к другу:  $J_n^2(P_{\Omega}^{(z)}) \approx J_{n-1}^2(P_{\Omega}^{(y)}) \approx J_{n,(aver)}^2$ , где  $J_{n,(aver)}^2 = [J_n^2(P_{\Omega}^{(z)}) + J_{n-1}^2(P_{\Omega}^{(y)})]/2$  – среднее значение коэффициентов усиления для поля  $z$ - и  $y$ -поляризации. Вторая спектральная область соответствует  $-5 \leq (\omega - \omega_{inc} - \bar{\omega}_z)/(2\Omega) \leq 16$  ( $-5 \leq n \leq 16$ ); в данной области отношение коэффициентов усиления для  $z$ - и  $y$ -поляризованных компонент поля с изменением номера линии  $n$  существенно изменяется. Практический интерес представляет первая спектральная область, так как она обеспечивает одинаковые условия преобразования линейной поляризации в циркулярную для высоких гармоник разных порядков. Стоит также отметить, что выбранный частотный сдвиг  $\Delta\omega_{yz} = 3.8\gamma$  обеспечивает наилучший баланс между абсолютным значением и равномерностью распределения величины  $\text{Im}(\tilde{G}_z) - \text{Im}(\tilde{G}_y)$ , характеризующей фазовый сдвиг между поляризованными составляющими поля высокой гармоники, располагающейся между линиями усиления из первой спектральной области (см. рис. 2б).

Далее рассмотрим преобразование поляризации одиночной высокой гармоники из первой спектральной области. Для определенности будем полагать, что ее частота располагается точно посередине между линией усиления для поля  $z$ -поляризации с номером  $n = -11$  и линией усиления для поля  $y$ -поляризации с номером  $n - 1 = -12$  (рис. 2б), при этом  $\omega_{inc} = \bar{\omega}_z + 2n\Omega + \Delta\omega_{yz}/2$ . Кроме того, для простоты будем полагать, что спектральная ширина контура высокой гармоники много меньше ширины линий усиления, так что излучение гармоники можно полагать монохроматическим:  $\tilde{S}_{inc}^{(z)}(\omega) = A \cos(\varphi)\delta(\omega)$ ,  $\tilde{S}_{inc}^{(y)}(\omega) = A \sin(\varphi)\delta(\omega)$ , где  $\delta(\omega)$  – дельта-функция Дирака. Учет конечной ширины спектрального контура поля гармоники качественно не изменит эффект преобразования поляризации, однако приведет к неоднородностям в распределении эллиптичности в пределах импульса высокой гармоники, которые обусловлены неоднородным по спектру усилением  $z$ - и  $y$ -компонент поля. Описание этих искажений выходит за рамки данной статьи и будет рассмотрено в последующих работах. Отметим только, что упомянутые неоднородности минимальны при условии настройки несущей частоты высокой гармоники точно посередине между соответствующими линиями усиления.

В силу того, что коэффициенты усиления для  $z$ - и  $y$ -поляризованных компонент поля рассматриваемой высокой гармоники близки друг к другу,  $J_{-11}^2(P_{\Omega}^{(z)}) \approx J_{-12}^2(P_{\Omega}^{(y)}) \approx J_{-11,(aver)}^2$ , а частота гармоники настроена посередине между соответствующими линиями усиления, отношение амплитуд поляризованных составляющих поля гармоники при распространении в среде сохраняется и определяется углом  $\varphi$  (см. рис. 1б):  $|\tilde{E}_y|/|\tilde{E}_z| \approx \text{tg}(\varphi)$ . Используя определение (7), нетрудно показать, что эллиптич-

ность излучения высокой гармоники в этом случае имеет вид:

$$\sigma \simeq \frac{1 - \sqrt{1 - \sin^2(2\varphi) \sin^2(\delta)}}{\sin(2\varphi) \sin(\delta)}, \quad (9)$$

где разность фаз между поляризационными компонентами поля гармоники определяется выражением

$$\delta \simeq g_0 x J_{n,(aver)}^2 \frac{\Delta\omega_{yz}/\gamma}{1 + (\Delta\omega_{yz}/2\gamma)^2}, \quad n = -11. \quad (10)$$

На рисунке 3 представлена зависимость эллиптичности  $\sigma$  от разности фаз между поляризационными

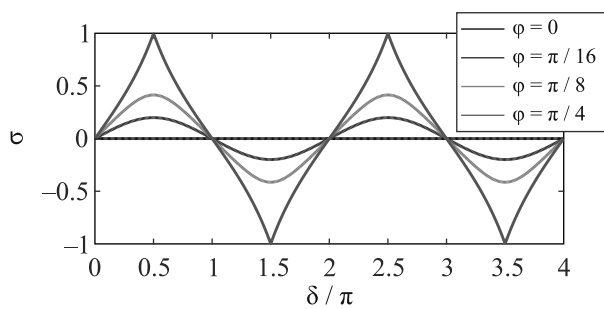


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость величины эллиптичности высокой гармоники,  $\sigma$ , определяемой выражением (9), от разности фаз между поляризационными компонентами,  $\delta$ , при различных значениях угла  $\varphi$  между направлениями поляризации поля высокой гармоники и модулирующего поля на входе в среду:  $\varphi = 0$  (черная линия),  $\varphi = \pi/16$  (синяя линия),  $\varphi = \pi/8$  (зеленая линия),  $\varphi = \pi/4$  (красная линия)

ми компонентами поля  $\delta$  при различных значениях угла  $0 \leq \varphi \leq \pi/4$  (как видно из (9), остальные значения угла  $\varphi$  с точностью до замены знака  $\sigma$  дают тот же результат). Видно, что при  $\delta_{\max} = \pi/2 + p\pi$ , где  $p = 0, 1, 2, \dots$ , эллиптичность поля гармоники достигает своего максимального при фиксированном  $\varphi$  абсолютного значения:  $|\sigma_{\max}| = |1 - |\cos(2\varphi)|| / |\sin(2\varphi)|$ . При этом в рассматриваемом интервале углов  $0 \leq \varphi \leq \pi/4$  четным  $p$  соответствуют положительные  $\sigma_{\max}$  и правая эллиптическая поляризация высокой гармоники, а нечетным  $p$  – отрицательные  $\sigma_{\max}$  и левая эллиптическая поляризация. Таким образом, на оптимальных толщинах активной среды, соответствующих значениям разности фаз  $\delta_{\max}$ , достигается эффективное преобразование поляризации излучения гармоники из линейной в эллиптическую. При этом на фиксированной толщине среды величиной эллиптичности можно управлять посредством изменения угла между направлениями поляризаций модулирующего поля и высокой гармоники.

При  $\varphi = \pi/4$  поляризационные компоненты поля гармоники на входе в среду имеют одинаковые амплитуды, что соответствует  $\sigma_{\max} = 1$  и преобразованию линейной поляризации поля гармоники в циркулярную. Стоит отметить, что учет небольшой разницы между коэффициентами усиления для составляющих поля  $z$ - и  $y$ -поляризации из первой спектральной области (учет различия  $J_n^2(P_\Omega^{(z)})$  и  $J_{n-1}^2(P_\Omega^{(y)})$ ,  $-15 \leq n \leq -6$ ) приводит лишь к незначительному уменьшению величины  $\sigma_{\max}$  из-за изменения относительных амплитуд поляризационных компонент поля гармоники в процессе усиления. К примеру, в рассматриваемом случае гармоники, располагаемой точно между линиями усиления с  $n = -11$ , при  $\varphi = \pi/4$  величина  $\sigma_{\max}$  для толщины среды, соответствующей  $\delta = \pi/2$ , составляет 0.98. Однако с увеличением толщины среды разница между амплитудами поляризационных составляющих увеличивается, что приводит к уменьшению величины  $\sigma_{\max}$ . Таким образом, оптимальной для получения поляризации, близкой к циркулярной, является толщина среды

$$x_{\text{circ}}^{(n)} \simeq \frac{\pi/2}{g_0 J_{n,(aver)}^2} \frac{1 + (\Delta\omega_{yz}/2\gamma)^2}{\Delta\omega_{yz}/\gamma}, \quad (11)$$

соответствующая наименьшему оптимальному фазовому сдвигу  $\delta = \pi/2$ . В рассматриваемом случае активной плазмы ионов  $\text{Ti}^{12+}$  и частоты высокой гармоники между линиями усиления с  $n = -11$  указанная толщина составляет  $x_{\text{circ}}^{(n)} \simeq 6.5$  мм. При этом благодаря усилению амплитуда поля гармоники увеличивается в  $\exp(0.5\pi\gamma/\Delta\omega_{yz}) \approx 1.5$  раза. Заметим, что выражение (11) справедливо для линий усиления с произвольным номером  $n$  из первой спектральной области.

**4. Преобразование линейной поляризации субфемто-/аттосекундных импульсов излучения высоких гармоник в циркулярную.** Перейдем к рассмотрению преобразования линейной поляризации в циркулярную для субфемто-/аттосекундных импульсов, образованных совокупностью  $2N + 1$  высоких гармоник (см. (3)). Как и прежде, будем полагать, что гармоники являются монохроматическими, обладают линейной поляризацией, ориентированной под углом  $\varphi = \pi/4$  относительно поляризации модулирующего поля (см. рис. 1b), и частота каждой из гармоник находится точно посередине между парой линий усиления для  $z$ - и  $y$ -поляризационных компонент поля с близкими коэффициентами усиления  $J_n^2(P_\Omega^{(z)}) \approx J_{n-1}^2(P_\Omega^{(y)}) \approx J_{n,(aver)}^2$ ,  $-15 \leq n \leq -6$  (см. рис. 2a). Кроме того, в целях наиболее эффективного усиления будем полагать, что центральная гармони-

ка с частотой  $\omega_{\text{inc}}$  во всех рассматриваемых далее случаях настроена между наиболее интенсивными линиями усиления для поля  $z$ - и  $y$ -поляризации, которым соответствуют номера  $n_z = n = -11$  и  $n_y = n - 1 = -12$ , так что выполняется равенство  $\omega_{\text{inc}} = \bar{\omega}_z - 22\Omega + \Delta\omega_{yz}/2$ . Тогда решения (6a) и (6b) для медленно меняющихся амплитуд  $z$ - и  $y$ -компонент высокочастотного поля примут вид:

$$\begin{aligned} \tilde{E}_z &= \frac{A}{\sqrt{2}} \sum_{n=-N}^N \exp \left[ \frac{g_0 x J_{n-11,(\text{aver})}^2}{1 - i\Delta\omega_{yz}/(2\gamma)} \right] e^{-i2n\Omega\tau}, \\ \tilde{E}_y &= \frac{A}{\sqrt{2}} \sum_{n=+N}^N \exp \left[ \frac{g_0 x J_{n-11,(\text{aver})}^2}{1 + i\Delta\omega_{yz}/(2\gamma)} \right] e^{-i2n\Omega\tau}. \end{aligned} \quad (12)$$

Из (12) видно, что из-за различия в коэффициентах усиления для высоких гармоник с разными номерами  $n$  (см. рис. 2a) гармоники разных порядков приобретают циркулярную поляризацию на разных толщинах среды (см. (11)). Это означает, что, строго говоря, линейную поляризацию излучения совокупности высоких гармоник не удастся преобразовать в циркулярную. Однако в рассматриваемом случае, когда высокие гармоники образуют последовательность субфемто-/аттосекундных импульсов, с практической точки зрения интерес представляет преобразование поляризации излучения в окрестности максимумов образуемых импульсов, где полная интенсивность суммарного поля гармоник по обоим поляризационным составляющим максимальна. Согласно (12) на передней границе среды  $x = 0$  максимумы импульсов достигаются в моменты времени  $\tau_{\text{pulse}} = k\pi$ , где  $k$  – целое число. При распространении излучения в среде  $z$ -компонента каждой из высоких гармоник приобретает положительный фазовый сдвиг, тогда как  $y$ -компонента – тот же по абсолютной величине отрицательный фазовый сдвиг. Это приводит к тому, что максимумы образуемых импульсов в  $z$ - и  $y$ -поляризации достигаются в моменты времени  $\tau_{\text{pulse}} \pm \Delta\tau$ , где знак “–” относится к  $z$ -поляризации, а знак “+” – к  $y$ -поляризации. Однако для рассматриваемых значений параметров активной плазмы ионов  $\text{Ti}^{12+}$  и модулирующего поля (в частности, соответствующих отстройке линий усиления  $\Delta\omega_{yz} = 3.8\gamma$  и коэффициента усиления по амплитуде  $g_0 = 35 \text{ см}^{-1}$ ) величина  $\Delta\tau$  оказывается порядка  $10^{-3}$  от периода модулирующего поля. Таким образом, в дальнейшем можно с хорошей точностью пренебречь смещением импульсов и предполагать, что их максимумы достигаются в моменты времени  $\tau_{\text{pulse}}$ .

Далее рассмотрим зависимость эллиптичности излучения совокупности высоких гармо-

ник, образующих последовательность субфемто-/аттосекундных импульсов, от толщины модулированной активной среды в моменты времени  $\tau_{\text{pulse}}$ . В силу того, что коэффициенты усиления для  $z$ - и  $y$ -составляющих поля гармоник близки друг к другу, а каждая из гармоник настроена точно посередине между соответствующими линиями усиления и при  $x = 0$  обладает линейной поляризацией, ориентированной под углом  $\varphi = \pi/4$  относительно поляризации модулирующего поля, при распространении в среде амплитуды поляризаационных компонент поля гармоник остаются близкими друг к другу,  $|\tilde{E}_y|/|\tilde{E}_z| \approx 1$ . При этом, как и в случае преобразования поляризации одиночной высокой гармоники, эллиптичность для совокупности высоких гармоник определяется выражением (9) при  $\varphi = \pi/4$ . Однако теперь выражение для разности фаз между поляризаационными составляющими  $\delta$  имеет вид:

$$\begin{aligned} \delta(x, \tau = \tau_{\text{pulse}}) &\simeq \\ &2 \arctg \left\{ \frac{\sum_{n=-N}^N \exp(G_n^{(\text{aver})} x) \sin(\Delta D_n^{(\text{aver})} x)}{\sum_{n=-N}^N \exp(G_n^{(\text{aver})} x) \cos(\Delta D_n^{(\text{aver})} x)} \right\} \end{aligned} \quad (13)$$

где  $G_n^{(\text{aver})} = g_0 J_{n-11,(\text{aver})}^2 / [1 + \Delta\omega_{yz}^2 / (2\gamma)^2]$ ,  $\Delta D_n^{(\text{aver})} = G_n^{(\text{aver})} \Delta\omega_{yz} / (2\gamma)$ .

На рисунке 4 приведены пространственные зависимости величины фазового сдвига  $\delta$  в моменты времени  $\tau_{\text{pulse}}$  (рис. 4a) для случаев преобразования поляризации совокупности трех ( $N = 1$ ), пяти ( $N = 2$ ) и семи ( $N = 3$ ) синфазных высоких гармоник, а также временные зависимости суммарной (по обоим поляризациям) интенсивности образуемых ими импульсов (рис. 4b–d, левая ось, синие линии) и соответствующей величины эллиптичности (рис. 4b–d, правая ось, красные линии) на оптимальных толщинах активной среды, соответствующих  $\delta = \pi/2$  (рис. 4a). Видно, что для каждого набора высоких гармоник существует своя оптимальная толщина среды, на которой образуемые ими импульсы становятся циркулярно поляризованными в том смысле, что излучение в пределах импульсов обладает эллиптичностью близкой к единице, в то время как между импульсами, где интенсивность поля мала, эллиптичность излучения является неоднородной функцией времени. При этом с увеличением числа высоких гармоник однородность распределения эллиптичности в пределах каждого импульса понижается, а соответствующая оптимальная толщина среды – увеличивается, что связано с различием

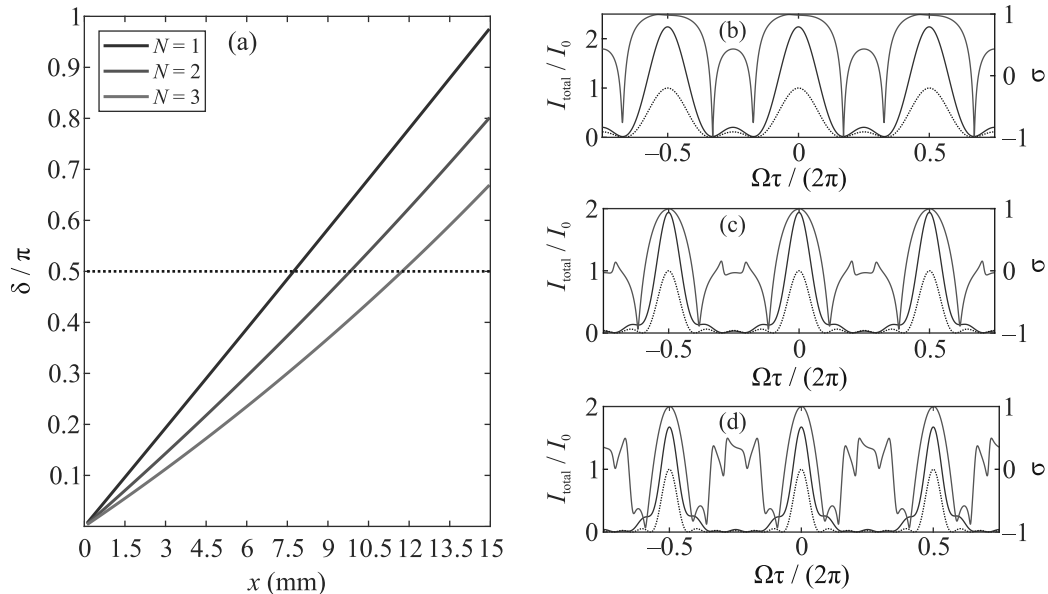


Рис. 4. (Цветной онлайн) (а)– Зависимости (13) величины фазового сдвига  $\delta$  между поляризационными компонентами излучения высоких гармоник в момент формирования максимума образуемых ими импульсов  $\tau_{\text{pulse}}$  от толщины среды  $x$  для совокупностей трех ( $N = 1$ , синяя линия), пяти ( $N = 2$ , красная линия) и семи ( $N = 3$ , зеленая линия) высоких гармоник. Черная пунктирная линия соответствует  $\delta = \pi/2$ . (b)–(d) – Временные зависимости нормированной суммарной (по поляризационным составляющим (12)) интенсивности (левая ось, синяя линия) и эллиптичности (правая ось, красная линия) излучения совокупности высоких гармоник на толщине среды, соответствующей  $\delta(\tau = \tau_{\text{pulse}}) = \pi/2$ . Черная пунктирная линия (левая ось) изображает временную зависимость интенсивности импульсов на передней границе активной среды. Рисунок (b) соответствует совокупности трех ( $N = 1$ ) высоких гармоник и толщине среды  $x = 7.7$  мм, (c) – совокупности пяти ( $N = 2$ ) высоких гармоник и  $x = 9.8$  мм, (d) – совокупности семи ( $N = 3$ ) гармоник и  $x = 11.7$  мм. Все рисунки построены для  $g_0 = 35 \text{ см}^{-1}$  и  $\Delta\omega_{yz} = 3.8\gamma$ . На рисунках (b)–(d)  $I_0 = (2N + 1)^2 cA^2 / (8\pi)$  – интенсивность импульсов на входе в среду

в величине коэффициентов усиления для гармоник разных порядков. Так, для совокупности трех высоких гармоник оптимальная толщина среды составляет 7.7 мм, для пяти гармоник – 9.8 мм, а для семи гармоник – 11.7 мм (рис. 4а). Кроме того, различие в коэффициентах усиления гармоник приводит к уменьшению эффективности усиления импульсов, а также к искажениям пьедестала, усиливающимся с ростом числа гармоник. Наконец отметим, что, как и в случае преобразования поляризации одиночной высокой гармоники, имеется возможность управления величиной эллиптичности субфемто-/аттосекундных импульсов путем изменения угла между направлениями поляризации модулирующего поля и поля высоких гармоник.

**4. Выводы.** Таким образом, в настоящей работе предложен метод преобразования линейно поляризованного излучения одиночной гармоники оптического поля высокого порядка, а также совокупности высоких гармоник, образующих последовательность субфемто-/аттосекундных импульсов, в эллиптически (с управляемой эллиптичностью) и,

частности, циркулярно поляризованное излучение в оптически модулированной неоноподобной активной среде плазменного рентгеновского лазера. Основная идея метода состоит во введении сдвига фаз в  $\pi/2$  между поляризационными составляющими излучения высоких гармоник благодаря резонансной дисперсии модулированной активной среды при оптимальной частотной настройке гармоник между индуцированными линиями усиления для ортогонально поляризованных компонент поля гармоник. В отличие от методов, использующих многослойную рентгеновскую оптику [31, 32], предложенный подход позволяет обеспечить гораздо (на два порядка) более высокую энергетическую эффективность преобразования излучения, превышающую 100% благодаря усилению поля гармоник. Другой важной особенностью предлагаемого метода является устойчивость к изменению числа высоких гармоник, образующих усиливаемые субфемто-/аттосекундные импульсы.

Возможность экспериментальной реализации предложенного метода рассмотрена на примере активной плазмы неоноподобных ионов  $\text{Ti}^{12+}$  с



невозмущенной длиной волны инвертированного перехода 32.6 нм. Однако данный метод может быть обобщен на случаи других неонов- и никелеподобных (например,  $\text{Mo}^{14+}$  и  $\text{Ag}^{19+}$  [46]) ионов, обладающих схожей структурой энергетических уровней, что открывает возможность эффективного преобразования поляризации высоких гармоник и образуемых ими импульсов в различных (в том числе, более коротковолновых) спектральных диапазонах.

Работа поддержана НЦМУ “Центр фотоники” при финансировании Министерством науки и высшего образования РФ, соглашение # 075-15-2020-906.

Авторы выражают благодарность О. А. Кочаровской за ценные обсуждения результатов, а также Х. Х. Рокка, М. А. Бериллу и В. Н. Шляпцеву за обсуждения и данные по энергетической структуре ионов  $\text{Tl}^{12+}$ .

1. F. Krausz and M. Ivanov, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 163 (2009).
2. M. Wu, S. Chen, S. Camp, K. J. Schafer, and M. B. Gaarde, *J. Phys. B* **49**, 062003 (2016).
3. L. Young, K. Ueda, M. Guhr et al. (Collaboration), *J. Phys. B* **51**, 032003 (2018).
4. R. Schoenlein, T. Elsaesser, K. Hollnack, Z. Huang, H. Kapteyn, M. Murnane, and M. Woerner, *Philos. Trans. R. Soc. A* **377**, 20180384 (2019).
5. C. Winterfeldt, C. Spielmann, and G. Gerber, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 117 (2008).
6. M. C. Kohler, T. Pfeifer, K. Z. Hatsagortsyan, and C. H. Keitel, *Adv. At. Mol. Opt. Phys.* **61**, 159 (2012).
7. В. В. Стрелков, В. Т. Платоненко, А. Ф. Стержантов, М. Ю. Рябикин, *УФН* **186**, 449 (2016).
8. P. B. Corkum, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1994 (1993).
9. M. Lewenstein, P. Balcou, M. Y. Ivanov, A. L’Huillier, and P. B. Corkum, *Phys. Rev. A* **49**, 2117 (1994).
10. K. S. Budil, P. Salieres, A. L’Huillier, T. Ditmire, and M. D. Perry, *Phys. Rev. A* **48**, R3437 (1993).
11. P. Antoine, A. L’Huillier, M. Lewenstein, P. Salieres, and B. Carre, *Phys. Rev. A* **53**, 1725 (1996).
12. C. T. Chen, F. Sette, Y. Ma, and S. Modesti, *Phys. Rev. B* **42**, 7262 (1990).
13. C. M. Schneider, M. S. Hammond, P. Schuster, A. Cebollada, R. Miranda, and J. Kirschner, *Phys. Rev. B* **44**, 12066 (1991).
14. N. Böwering, T. Lischke, B. Schmidtke, N. Müller, T. Khalil, and U. Heinzmann, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1187 (2001).
15. E. A. Schneidmiller and M. V. Yurkov, *Phys. Rev. ST Accel. Beams* **16**, 110702 (2013).
16. E. Ferrari, E. Allaria, J. Buck, G. De Ninno, B. Diviacco, D. Gauthier, L. Giannessi, L. Glaser, Z. Huang, M. Ilchen, G. Lambert, A. A. Lutman, B. Mahieu, G. Penco1, C. Spezzani, and J. Viefhaus, *Sci. Rep.* **5**, 13531 (2015).
17. A. A. Lutman, J. P. MacArthur, M. Ilchen et al. (Collaboration), *Nature Photon.* **10**, 468 (2016).
18. S. Ackermann, A. Azima, S. Bajt et al. (Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **111**, 114801 (2013).
19. V. V. Strelkov, M. A. Khokhlova, A. A. Gonoskov, I. A. Gonoskov, and M. Yu. Ryabikin, *Phys. Rev. A* **86**, 013404 (2012).
20. X. Zhou, R. Lock, N. Wagner, W. Li, H. C. Kapteyn, and M. M. Murnane, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 073902 (2009).
21. E. Skantzakis, S. Chatziathanasiou, P. A. Carpeggiani, G. Sansone, A. Nayak, D. Gray, P. Tzallas, D. Charalambidis, E. Hertz, and O. Faucher, *Sci. Rep.* **6**, 39295 (2016).
22. G. Lambert, B. Vodungbo, J. Gautier, B. Mahieu, V. Malka, S. Sebban, P. Zeitoun, J. Luning, J. Perron, A. Andreev, S. Stremoukhov, F. Ardana-Lamas, A. Dax, C. P. Hauri, A. Sardinha, and M. Fajardo, *Nat. Commun.* **6**, 6167 (2015).
23. C. Zhai, R. Shao, P. Lan, B. Wang, Y. Zhang, H. Yuan, S. M. Njoroge, L. He, and P. Lu, *Phys. Rev. A* **101**, 053407 (2020).
24. A. Fleischer, O. Kfir, T. Diskin, P. Sidorenko, and O. Cohen, *Nature Photon.* **8**, 543 (2014).
25. O. Kfir, P. Grychtol, E. Turgut, R. Knut, D. Zusin, D. Popmintchev, T. Popmintchev, H. Nembach, J. M. Shaw, A. Fleischer, H. Kapteyn, M. Murnane, and O. Cohen, *Nature Photon.* **9**, 99 (2015).
26. A. Depresseux, E. Oliva, J. Gautier, F. Tissandier, G. Lambert, B. Vodungbo, J.-P. Goddet, A. Tafzi, J. Nejdil, M. Kozlova, G. Maynard, H. T. Kim, K. Ta Phuoc, A. Rousse, P. Zeitoun, and S. Sebban, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 083901 (2015).
27. I. R. Khairulin, V. A. Antonov, M. Yu. Ryabikin, M. A. Berrill, V. N. Shlyaptsev, J. J. Rocca, and O. Kocharovskaya, *Sci. Rep.* **12**, 6204 (2022).
28. J. B. Kortright and J. H. Underwood, *Nucl. Instrum. Methods A* **291**, 272 (1990).
29. F. Schäfers, H.-Ch. Mertins, A. Gaupp, W. Gudat, M. Mertin, I. Packe, F. Schmolla, S. Di Fonzo, G. Soullié, W. Jark, R. Walker, X. Le Cann, R. Nyholm, and M. Eriksson, *Appl. Opt.* **38**, 4074 (1999).
30. H. Kimura, T. Miyahara, Y. Goto, K. Mayama, M. Yanagihara, and M. Yamamoto, *Rev. Sci. Instrum.* **66**, 1920 (1995).
31. B. Vodungbo, A. B. Sardinha, J. Gautier, G. Lambert, C. Valentin, M. Lozano, G. Iaquaniello, F. Delmotte, S. Sebban, J. Luning, and P. Zeitoun, *Opt. Express* **19**, 4346 (2011).
32. J. Schmidt, A. Guggenmos, M. Hofstetter, S. H. Chew, and U. Kleineberg, *Opt. Express* **23**, 33564 (2015).
33. P. V. Nickles, V. N. Shlyaptsev, M. Kalachnikov, M. Schnürer, I. Will, and W. Sandner, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2748 (1997).

34. D. Alessi, B.M. Luther, Y. Wang, M.A. Larotonda, M. Berrill, and J.J. Rocca, *Opt. Express* **13**, 2093 (2005).
35. M. Chini, B. Zhao, H. Wang, Y. Cheng, S.X. Hu, and Z. Chang, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 073601 (2012).
36. В. С. Попов, *УФН* **174**, 921 (2004).
37. I.R. Khairulin, V.A. Antonov, M.Yu. Ryabikin, and O. Kocharovskaya, *Photonics* **9**, 51 (2022).
38. T.R. Akhmedzhanov, V.A. Antonov, A. Morozov, A. Goltsov, M. Scully, S. Suckewer, and O. Kocharovskaya, *Phys. Rev. A* **96**, 033825 (2017).
39. I.R. Khairulin, V.A. Antonov, M.Yu. Ryabikin, and O. Kocharovskaya, *Phys. Rev. Res.* **2**, 023255 (2020).
40. V.A. Antonov, I.R. Khairulin, and O. Kocharovskaya, *Phys. Rev. A* **102**, 063528 (2020).
41. И. Р. Хайрулин, В. А. Антонов, О. А. Кочаровская, *Квантовая электроника* **50**, 375 (2020).
42. I.R. Khairulin, V.A. Antonov, M.Yu. Ryabikin, and O. Kocharovskaya, *Phys. Rev. A* **107**, 023507 (2023).
43. M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics*, Pergamon Press, N.Y. (1964).
44. G. Andriukaitis, T. Balciunas, S. Ališauskas, A. Pugžlys, A. Baltuška, T. Popmintchev, M.-C. Chen, M.M. Murnane, and H.C. Kapteyn, *Opt. Lett.* **36**, 2755 (2011).
45. Z. Samsonova, S. Hofer, V. Kaymak, S. Ališauskas, V. Shumakova, A. Pugžlys, A. Baltuska, T. Siefke, S. Kroker, A. Pukhov, O. Rosmej, I. Uschmann, C. Spielmann, and D. Kartashov, *Phys. Rev. X* **9**, 021029 (2019).
46. M. Berrill, Y. Wang, M.A. Larotonda, B.M. Luther, V.N. Shlyaptsev, and J.J. Rocca, *Phys. Rev. A* **75**, 063821 (2007).

# Оптомеханические эффекты нагрева и охлаждения при гигантском комбинационном рассеянии света в среде с близкой к нулю диэлектрической проницаемостью

А. Р. Газизов<sup>+\*1)</sup>, М. Х. Салахов<sup>++</sup>, С. С. Харинцев<sup>++</sup>

<sup>+</sup>Институт физики, Казанский федеральный университет, 420008 Казань, Россия

<sup>\*</sup>Институт прикладных исследований, Академия наук РТ, 420111 Казань, Россия

Поступила в редакцию 23 марта 2023 г.

После переработки 31 марта 2023 г.

Принята к публикации 31 марта 2023 г.

Среды, у которых диэлектрическая проницаемость  $\varepsilon(\omega)$  может достигать околонулевых значений (ENZ), позволяют создать условия для усиления взаимодействия света с веществом. В настоящей работе предлагается использовать данные среды для усиления оптомеханической связи колебательных возбуждений среды с оптическим ближнем полем нанополости. Показано, что ENZ среда существенно увеличивает оптически индуцированную скорость релаксации колебания, что может быть использовано для охлаждения (при частоте падающего света меньше частоты ENZ) или нагрева (при частоте падающего света больше частоты ENZ). Благодаря близости показателя преломления к нулю, колебания поляризации среды происходят когерентно, что еще больше усиливает оптомеханические эффекты. Получены аналитические выражения для оптического сдвига резонанса и индуцированной скорости релаксации.

DOI: 10.31857/S1234567823090057, EDN: boljpl

В настоящее время одной из задач нанофотоники является управление взаимодействием света с индивидуальными нанобъектами и его различными модами возбуждения. В частности, свет может быть использован не только в качестве спектроскопического зонда наноразмерных объектов [1], но и для поддержания определенной локальной температуры, например, с использованием явлений фотоиндуцированного нагрева и лазерного охлаждения твердого тела [2, 3]. Управление локальной температурой особенно важно для избирательного контроля над состоянием объекта, что находит применение в областях от гравитационной и квантовой сенсорики [4–6] до биотехнологий [7] и оптических интегральных схем [8].

Одним из физических механизмов лазерного охлаждения является комбинационное рассеяние света (КР), которое может рассматриваться в рамках подхода молекулярной оптомеханики [9, 10]. Для этого система с механическими степенями свободы помещается в оптический резонатор. Возникающие оптические силы ведут к когерентной перекачке энергии из механических колебаний в оптическое поле (антистоксово КР) или наоборот

(стоксово КР) [11]. Как следствие, для охлаждения используют различные внутренние и оптические резонансы, чтобы увеличить сечение антистоксова рассеяния [12] или подавить стоксово рассеяние [13]. Возможность увеличения колебательной температуры с помощью гигантского КР была известна десятилетия назад [14, 15]. Однако существующими методами колебания твердого тела были охлаждены всего на 60 К в полупроводниках при 1.1 мВт накачки [12], что рождает спрос на более эффективные методы локального охлаждения. Мы предлагаем для этого использовать субволновую локализацию световой энергии и среду с околонулевой диэлектрической проницаемостью (ENZ, англ. *epsilon-near-zero*). Это позволит уменьшить размеры оптических рефрижераторов и снизить их энергопотребление. К слову, металлические нанорезонаторы за счет уменьшения модового объема обладают параметром оптомеханической связи, который на 4–5 порядков превышает параметр традиционных оптомеханических микрорезонаторов, что теоретически позволяет добиться нелинейного колебательного отклика от одиночной молекулы при умеренных интенсивностях в 10 МВт/см<sup>2</sup> [9].

В настоящее время оптомеханические эффекты в средах с ENZ практически не изучены. Для то-

<sup>1)</sup>e-mail: almargazizov@kpfu.ru

го чтобы реализовать оптическое охлаждение, антистоксово КР должно не только превосходить стоксово КР, но и быть эффективнее поглощения. В отличие от обычной плазмоники, материалы с ENZ и гибридные оптоплазмонные структуры обладают гораздо меньшими оптическими потерями [16–18], что позволяет их рассматривать и как перспективную платформу для реализации охлаждения. Например, в оптоплазмонных резонаторах с ENZ показана возможность реализации ультрасильной колебательной связи [19]. Среда с ENZ усиливает продольные поля, внутри такой среды свет ведет себя “электростатически”, что выражается в малой групповой и расходящейся фазовой скорости [20, 21]. В модели свободного электронного газа Друде, условие  $\text{Re}[\varepsilon] = 0$  соответствует объемному плазмонному резонансу на частоте  $\omega_p$ . Поэтому такие среды приближенно можно рассматривать как оптический резонатор продольных волн [22] или туннелирующих волн [23]. Более того, из-за малого показателя преломления  $n = \sqrt{\varepsilon}$  в таких средах дополнительно усиливаются нелинейные эффекты [17, 21, 24, 25], в том числе нелинейное КР [26, 27]. Дополнительный интерес в использовании этих материалов связан с развитием методов их синтеза и возможностью настраивания их оптических свойств [21].

В данной работе исследуется оптомеханическое взаимодействие колебательных мод среды с ENZ с полем, усиленным с помощью оптической плазмонной нанополосы. Рассматривая оптический фонon и ближнее поле нанополосы в среде с ENZ совместно как оптомеханическую систему, получены выражения для оптически индуцированных сдвига частоты резонанса  $\Delta\Omega$  и скорости затухания  $\Gamma_{\text{opt}}$ . Исследованы условия достижения режима, при котором происходит усиленное антистоксово рассеяние, и оно приобретает когерентный характер. С помощью численного моделирования определены локальные плотности состояний внутри такой среды вблизи ее границы для области частот КР.

На рисунке 1 изображена геометрия рассматриваемой оптомеханической системы: коническая нанополоса подведена к подложке с ENZ на расстояние  $d$ . Нанополоса наклонена на некоторый угол  $\theta$ , для того чтобы повернуть поляризацию падающего поля (параллельную поверхности подложки) и появились нормальные к подложке компоненты. Более того, из-за близости показателя преломления нулю подложка имеет высокий коэффициент отражения, нанополоса используется для согласования поверхностных импедансов и увеличения передачи энергии внутрь ENZ среды [28]. Рассмотрим взаимодействие поля с

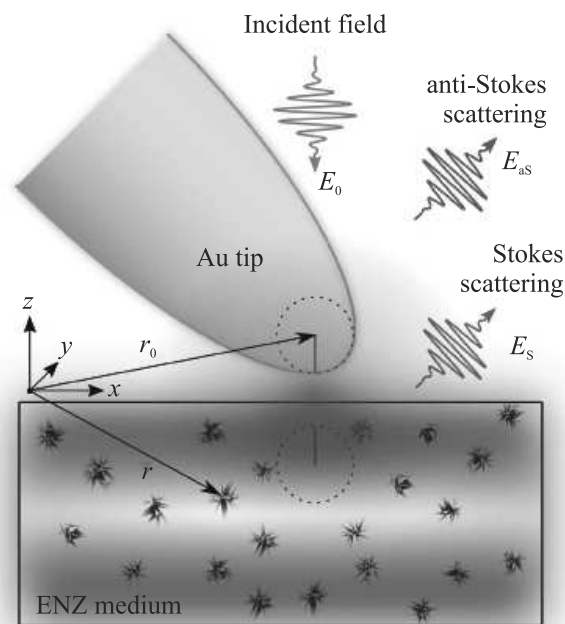


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схематическое изображение рассматриваемой системы: золотое острие поднесено близко к подложке из материала с близкой к нулю диэлектрической проницаемостью  $\text{Re}[\varepsilon] \approx 0$ . Внутри среды изображены активные центры КР. Штриховой линией показано сечение соприкасающейся сферической поверхности острия и ее изображения

одной колебательной модой. В данной работе мы используем подход, при котором фононы описываются квантовым гармоническим осциллятором, а электромагнитное поле описывается в терминах полевых операторов  $\hat{\mathbf{E}}$  напряженности поля. Запишем гамильтониан оптомеханической системы в приближении Борна–Оппенгеймера в виде, аналогичном представленному в статьях [9–12]:

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{EM}} + \hbar\Omega_0\hat{b}^\dagger\hat{b} - \frac{1}{2}\hat{\mathbf{E}}\frac{\partial\vec{\alpha}}{\partial Q}\hat{\mathbf{E}}Q_0(\hat{b}^\dagger + \hat{b}), \quad (1)$$

где  $\hat{H}_{\text{EM}}$  – гамильтониан электромагнитного поля в среде,  $\Omega_0$  – собственная частота гармонического осциллятора,  $\hat{b}^\dagger$  и  $\hat{b}$  – операторы рождения и уничтожения фонона,  $Q_0$  – амплитуда нулевых колебаний,  $\vec{R}_Q = (\partial\vec{\alpha}/\partial Q)$  – тензор КР данного нормального колебания. Обозначим через  $\hat{F}_Q = \frac{1}{2}\hat{\mathbf{E}}\vec{R}_Q\hat{\mathbf{E}}$  вынуждающую оптическую силу, соответствующую координате  $Q$ . Из гамильтониана (1) можно получить уравнения движения в представлении Гейзенберга, считая полевые и фононные операторы коммутирующими.

Уравнение Гейзенберга для оператора числа фононов имеет вид:

$$\hat{n} = \frac{iQ_0}{\hbar} \hat{F}_Q (\hat{b}^\dagger - \hat{b}) + \hat{O}[\hat{n}], \quad (2)$$

где посредством  $\hat{O}[\hat{n}]$  обозначены члены, отвечающие за взаимодействие фононов с резервуаром. При этом уравнение Гейзенберга для электромагнитного поля в частотной области приобретает вид уравнения Гельмгольца в операторной форме, где роль внешних токов играет наведенная фононом в среде поляризация [29, 30]:

$$\nabla \times \nabla \times \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) - \varepsilon(\omega) \frac{\omega^2}{c^2} \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{\omega^2}{\varepsilon_0 c^2} N \frac{\partial \alpha}{\partial Q} \hat{Q} \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega), \quad (3)$$

где  $\varepsilon(\omega)$  – диэлектрическая проницаемость среды, активной в КР,  $\hat{Q} = Q_0(\hat{b}^\dagger + \hat{b})$  – оператор координаты колебания,  $N$  – концентрация рассеивателей.

Поле в среде представим в виде суммы локальных полей на падающей  $\omega_L$ , стоксовой  $\omega_S$  и антистоксовой  $\omega_{aS}$  частоте, для каждого из которых справедливо уравнение (3). При этом поле на падающей частоте считается классическим. Это соответствует традиционному подходу резонаторной оптики, в котором нелинейность является возмущением [11]. В комплексных амплитудах вынуждающая сила примет вид (оставлены лишь резонансные члены):

$$\hat{F}_Q = \mathbf{E}_S^\dagger \vec{R}_Q \hat{\mathbf{E}}_L + \hat{\mathbf{E}}_L^\dagger \vec{R}_Q \mathbf{E}_{aS} + \mathbf{E}_L^* \vec{R}_Q \hat{\mathbf{E}}_S + \hat{\mathbf{E}}_{aS}^\dagger \vec{R}_Q \mathbf{E}_L, \quad (4)$$

где  $\mathbf{E}_L$ ,  $\hat{\mathbf{E}}_S$  и  $\hat{\mathbf{E}}_{aS}$  – комплексные амплитуды падающего, стоксова и антистоксова поля в среде соответственно. Для того чтобы определить локальные поля  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)$  на частотах падающего излучения и смещенных КР в различных точках ENZ подложки, можно использовать метод тензорной функции Грина, причем сам тензор Грина не является квантовомеханическим оператором [30–32]. Отметим, что при ультрасильной связи решение нелинейной задачи не может быть записано с помощью функции Грина, так как не выполняется принцип суперпозиции.

В нашей модели оптическая наноантенна представляется в виде элементарных диполей, в то время как взаимодействие с подложкой описывается в рамках приближения сплошной среды [33]. Определить локальное поле можно численно, используя метод дискретно-дипольной аппроксимации [34]. Однако в отличие от него в нашей модели при взаимодействии с падающим светом наноантенна рассматривается как единый точечный диполь с поляризуемостью наносфероида, расположенный в центре кри-

стизны вершины. В то же время, индукция ближнего поля на наноантенне определяется по квазистатической теории изображений для поляризуемого шара [33, 35]. Локальное электрическое поле  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega_L)$  в точке  $\mathbf{r}$  в этой модели записывается в виде:

$$\mathbf{E}_L(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}) + \frac{\omega_L^2}{\varepsilon_0 c^2} \vec{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \vec{\alpha}_{\text{tip}} \mathbf{E}_0(\mathbf{r}_0), \quad (5)$$

где  $\mathbf{E}_0$  – падающее поле,  $\vec{\alpha}_{\text{tip}}$  – поляризуемость наноантенны в точке  $\mathbf{r}_0$ ,  $\vec{G}$  – полная тензорная функция Грина для системы поляризуемого шара и подложки [33], которая является решением интегрального уравнения типа Дайсона.

С использованием этого подхода полевые операторы стоксова и антистоксова поля приобретают вид:

$$\hat{\mathbf{E}}_S(\mathbf{r}) = \frac{\omega_S^2 N}{\varepsilon_0 c^2} \int' \vec{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega_S) \frac{\partial \alpha}{\partial Q} Q_0 \hat{b}^\dagger \mathbf{E}_L(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}',$$

$$\hat{\mathbf{E}}_{aS}(\mathbf{r}) = \frac{\omega_{aS}^2 N}{\varepsilon_0 c^2} \int' \vec{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega_{aS}) \frac{\partial \alpha}{\partial Q} Q_0 \hat{b} \mathbf{E}_L(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}'. \quad (6)$$

Штрих около знака интеграла в уравнении (6) означает частичное интегрирование. Связано оно с частичной когерентностью полей на смещенной КР частоте.

В микроскопии гигантского КР известно, что спонтанное рассеяние приобретает когерентный характер благодаря локализации оптического поля в пределах объема когерентности фонона [36]. Оптические силы, действующие со стороны полей, образованных от множества некогерентных рассеивающих центров, складываясь, компенсируют друг друга. Поэтому оптико-механическое взаимодействие так же происходит преимущественно внутри объема когерентности фонона. Оптическая сила с учетом этих рассуждений и уравнений (4) и (6) принимает вид:

$$\hat{F}_Q(\mathbf{r}) = Q_0 \int' [f(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{b} + f^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{b}^\dagger] d^3 \mathbf{r}', \quad (7)$$

где функция  $f(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = (N/\varepsilon_0 c^2) \mathbf{E}_L^* \vec{R}_Q [\omega_S^2 \vec{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega_S) + \omega_{aS}^2 \vec{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega_{aS})] \vec{R}_Q \mathbf{E}_L$  имеет смысл индуцированной ближним оптическим полем “силовой постоянной” гармонического осциллятора (более строго: плотность производной силы по координате нормального колебания). Согласно данному физическому смыслу, действительная часть этой величины вносит вклад в квадрат собственной частоты нормального колебания (эффект оптической пружины), а мнимая часть является оптически индуцированной скоростью затухания [11]. В самом деле, решая

уравнение (2) для средней населенности, можно получить:

$$\Gamma_{\text{opt}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\Omega_0} \int' \text{Im}[f(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] d^3 \mathbf{r}'. \quad (8)$$

Аналогично уравнению (2), можно получить уравнение Гейзенберга для оператора координаты  $\hat{Q}$ , откуда получается оптически индуцированный сдвиг частоты резонанса:

$$\Omega_{\text{opt}}^2(\mathbf{r}) = \Omega_0^2 - \int' \text{Re}[f(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] d^3 \mathbf{r}'. \quad (9)$$

Подобный эффект сдвига частоты КР предсказывался нами ранее в случае вынужденного комбинационного рассеяния в среде ENZ [37].

Режиму охлаждения соответствует  $\Gamma_{\text{opt}} > 0$ , при этом также наблюдается сдвиг линии в спектре КР. Важно отметить, что описываемые эффекты происходят в пространстве неоднородно – скорость релаксации фонона зависит от точки в пространстве. В полностью некогерентном случае на рассеивающий центр действует оптическая сила, порожденная самим рассеивателем, поэтому тензор Грина в выражении для  $f(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  следует определять в самом месте нахождения рассеивателя. Учитывая, что частичная локальная плотность электромагнитных состояний  $\rho_p(\mathbf{r}, \omega) = (6\omega/\pi c^2) \text{Im}[G_{pp}(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \omega)]$  определяется через мнимую часть проекции тензора Грина на направление дипольного момента рассеивателя, выражение (8) можно переписать в виде:

$$\Gamma_{\text{opt}}(\mathbf{r}) = \frac{\pi \mathbf{E}_L^* \overset{\leftrightarrow}{R}_Q \overset{\leftrightarrow}{R}_Q \mathbf{E}_L}{6\epsilon_0 \Omega_0} [\omega_{aS} \rho_p(\mathbf{r}, \omega_{aS}) - \omega_S \rho_p(\mathbf{r}, \omega_S)]. \quad (10)$$

Данная запись наглядно демонстрирует основную закономерность – усиление антистоксова рассеяния приводит к охлаждению осциллятора, усиление стоксова КР – к колебательной накачке. Известно, что локальная плотность состояний диссипативной среды содержит сингулярность в точке источника, однако ее устраняют методами регуляризации [38]. Регуляризация в данном случае означает интегрирование функции Грина в малом объеме, что может быть интерпретировано как физическая невозможность равенства нулю объема когерентности. На рисунке 2 изображены частичные локальные плотности состояний внутри ENZ подложки для двух различных ориентаций диполя относительно поверхности в присутствии острия нанопластины. Численное моделирование проведено в конечных разностях во временной области [39]. Видно, что на частоте  $\omega_{\text{ENZ}}$  около нулевого значения проницаемости имеется макси-

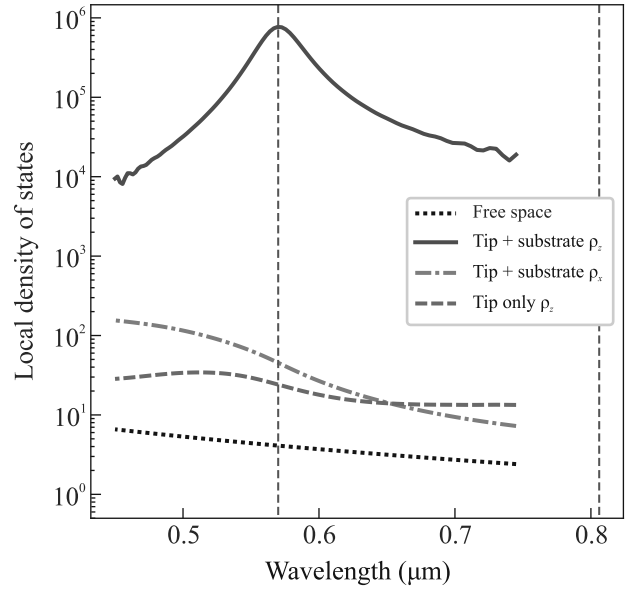


Рис. 2. (Цветной онлайн) Вид зависимости частичной локальной плотности состояний  $\rho_p$  от длины волны внутри ENZ подложки в присутствии золотой нанопластины, построенной для диполя, ориентированного по оси  $Z$  (синяя сплошная) и ориентированного по оси  $X$  (оранжевый штрих-пунктир). Отдельно показаны плотности состояний вблизи золотой нанопластины без ENZ подложки (зеленая штриховая) и в вакууме (черный пунктир). В модели Друде для ENZ среды выбраны  $\lambda_p = 0.57$  мкм,  $\gamma_p = 0.033$  фс $^{-1}$ . Параметры острия: радиус  $r_{\text{tip}} = 12$  нм, центр кривизны  $z = 15$  нм выше подложки. Диполь находился на 20 нм в глубине подложки. Красными штриховыми линиями показаны положения объемного и поверхностного плазмонных резонансов. Моделирование выполнено в пакете МЕЕР [39]

мум плотности, связанный с плазменными колебаниями. Конечность и усиление плотности состояний для ENZ подложек была показана нами в работе [40]. Более того, нанопластина практически не влияет на положение резонанса внутри среды. Подобные результаты были известны и ранее [28]. Назначение антенны в том, что она локализует энергию оптического поля в объеме, сравнимом с объемом когерентности фононной моды материала ENZ. Также если ее плазмонный резонанс настроен на частоту  $\omega_{aS}$  антистоксова КР, то она способствует эвакуации излучения в дальнюю зону [1], тем самым предотвращая повторное поглощение на антистоксовой частоте.

В когерентном же случае интегрирование функции Грина происходит в существенно большем объеме. На рисунке 3 приведены результаты моделирования оптомеханических эффектов в двух режимах. Для определения функций Грина в ближнем

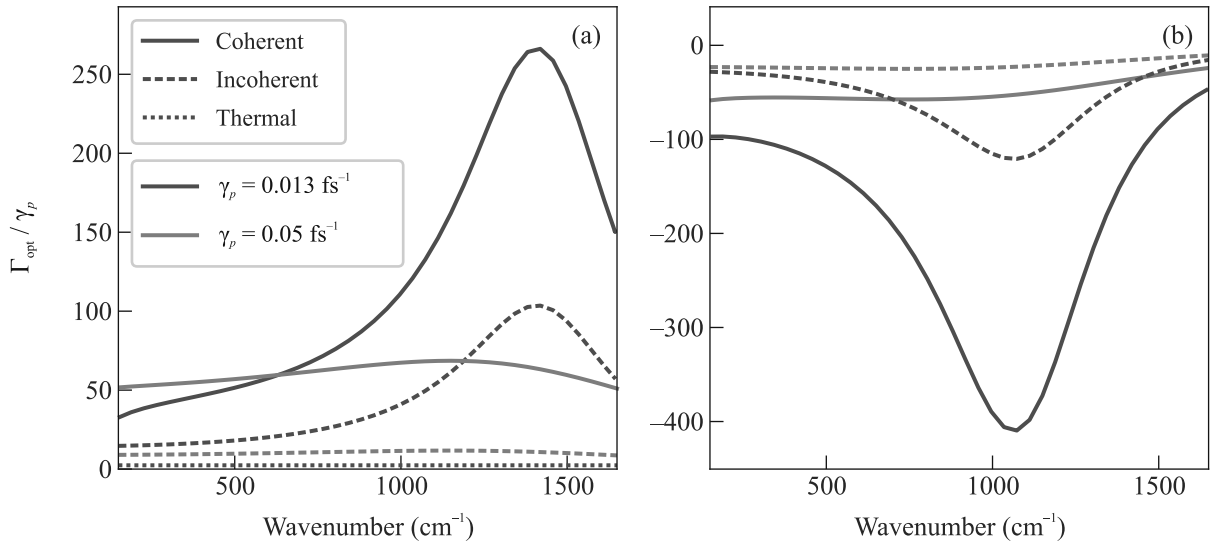


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость  $\Gamma_{\text{opt}}$  от волнового числа КР, рассчитанная при длине волны накачки  $\lambda = 632.8$  нм для (а) –  $\lambda_p = 0.58$  мкм и (б) –  $\lambda_p = 0.68$  мкм в когерентном (сплошные кривые) и некогерентном случае (штриховые линии) для сред с параметром модели Друде  $\gamma_p = 0.013 \text{ фс}^{-1}$  (синие кривые) и  $\gamma_p = 0.05 \text{ фс}^{-1}$  (оранжевые кривые). Отдельно отмечена величина  $\Gamma_{\text{therm}}$  при  $\gamma_p = 0.013 \text{ фс}^{-1}$  (пунктир) для соответствующей напряженности поля

поле, использовался квазистатический вариант методов дискретно-дипольной аппроксимации и изображений [33, 34]. Это оправдано тем, что длина волны в среде ENZ много больше размеров моделируемой области. Упрощая картину, в когерентном случае интегрирование велось по всем дискретным диполям, в некогерентном – по одному. Для заданного положения частоты  $\omega_{\text{ENZ}}$  определена зависимость оптически индуцированной скорости затухания от волнового числа КР. Для простоты был взят изотропный тензор КР. В области волновых чисел вблизи  $\omega_{\text{ENZ}}$  в спектре КР имеется полоса оптомеханического резонанса. Видно, что в когерентном случае абсолютная величина  $\Gamma_{\text{opt}}$  больше, чем в некогерентном. Однако точное отношение двух величин зависит от параметров моделирования – плотности дискретных диполей и размеров области моделирования. Связано это с тем, что оба параметра связаны с объемом интегрирования в некогерентном и когерентном случаях соответственно. Важно отметить, что оптически индуцированная скорость релаксации  $\Gamma_{\text{opt}}$  фонона на порядки превосходит скорость релаксации объемного плазмона  $\gamma_p$  в среде ENZ.

Мнимая часть диэлектрической проницаемости так же влияет на оптомеханическую связь. Во-первых, она приводит к модификации условия на  $\varepsilon(\omega)$ , при котором усиление электрического поля в среде ENZ наибольшее, что ведет к смещению резонанса [41]. Во-вторых, как видно из рис. 3, при увеличении параметра  $\gamma_p$  ожидаемо падает добротность.

Это ведет к уменьшению оптомеханической связи и низким скоростям релаксации. Более того, поглощение света приводит к дополнительному нагреву, что приближенно можно представить как увеличение средней населенности со скоростью:

$$\Gamma_{\text{therm}} = \frac{\omega_L}{2NkT} \varepsilon'' \varepsilon_0 |\mathbf{E}_L|^2, \quad (11)$$

где  $k$  – постоянная Больцмана. Отметим, что поглощенная энергия распределяется по всем степеням свободы колебаний. Для осуществления охлаждения необходимо выполнение условия  $\Gamma_{\text{opt}} > \Gamma_{\text{therm}}$ . Это возможно при достаточно маленьких значениях мнимой части  $\varepsilon(\omega)$  в зависимости от величины  $R_Q$ .

В заключение отметим, что в данной работе теоретически проанализированы и продемонстрированы оптомеханические эффекты нагрева и охлаждения в средах с околонулевыми значениями диэлектрической проницаемости. Используя подход вторичного квантования и тензорной функции Грина, получены выражения для оптического сдвига частоты колебания и индуцированной скорости релаксации  $\Gamma_{\text{opt}}$ . Выражение для  $\Gamma_{\text{opt}}$  связывает оптомеханические эффекты с локальной плотностью состояний, а также открывает путь для моделирования этих эффектов. Развитый подход позволяет учитывать эффекты деполаризации ближнего поля и исследовать оптомеханику колебаний с различной структурой тензора КР. Присутствие наноантенны позволяет локализовать оптическое поле в масштабах объема когерентности фонона (зависит от материала) и

перейти в режим сильной оптомеханической связи. Эффект носит резонансный характер, причем ширина резонанса в случае наличия большого поглощения света в среде оказывается больше, что приводит к ослаблению оптомеханической связи и дополнительному нагреву среды.

Работа выполнена за счет средств Российского научного фонда (# 21-72-00052).

Авторы благодарят н.с. А. И. Гарифуллина и с.н.с. А. В. Харитонову (Казанский федеральный университет) за ценные замечания к работе.

1. P. Bharadwaj, B. Deutsch, and L. Novotny, *Adv. Opt. Photonics* **1**, 438 (2009).
2. G. Baffou, F. Cichos, and R. Quidant, *Nat. Mater.* **19**, 946 (2020).
3. D. V. Seletskiy, R. Epstein, and M. Sheik-Bahae, *Rep. Prog. Phys.* **79**, 096401 (2016).
4. V. B. Braginsky, S. E. Strigin, and S. P. Vyatchanin, *Phys. Lett. A* **305**, 111 (2002).
5. J. Chan, T. P. M. Alegre, A. H. Safavi-Naeini, J. T. Hill, A. Krause, S. Groblacher, M. Aspelmeyer, and O. Painter, *Nature* **478**, 89 (2011).
6. D. Rugar, R. Budakian, H. J. Mamin, and B. W. Chui, *Nature* **430**, 329 (2004).
7. E. Gil-Santos, J. J. Ruz, O. Malvar, I. Favero, A. Lemaître, P. M. Kosaka, S. García-López, M. Calleja, and J. Tamayo, *Nat. Nanotechnol.* **15**, 469 (2020).
8. А. В. Цуканов, И. Ю. Катеев, *Квантовая электроника* **50**, 291 (2020) [*Quantum Electron.* **50**, 291 (2020)].
9. P. Roelli, C. Galland, N. Piro, and T. J. Kippenberg, *Nat. Nanotechnol.* **11**, 164 (2016).
10. Y. Zhang, R. Esteban, R. A. Boto, M. Urbiet, X. Arrieta, C. Shan, S. Li, J. J. Baumberg, and J. Aizpurua, *Nanoscale* **13**, 1938 (2021).
11. M. Aspelmeyer, T. J. Kippenberg, and F. Marquardt, *Rev. Mod. Phys.* **86**, 1391 (2014).
12. J. Zhang, Q. Zhang, X. Wang, L. C. Kwek, and Q. Xiong, *Nature Photon.* **10**, 600 (2016).
13. Y.-C. Chen and G. Bahl, *Optica* **2**, 893 (2015).
14. K. Kneipp and H. Kneipp, *Faraday Discuss.* **132**, 27 (2006).
15. R. C. Maher, P. G. Etchegoin, E. C. Le Ru, and L. F. Cohen, *J. Phys. Chem. B* **110**, 11757 (2006).
16. Y. Hong and B. M. Reinhard, *J. Opt.* **21**, 113001 (2019).
17. M. Scalora, J. Trull, D. de Ceglia, M. A. Vincenti, N. Akozbek, Z. Coppens, L. Rodríguez-Suné, and C. Cojocar, *Phys. Rev. A* **101**, 053828 (2020).
18. I. M. Palstra, H. M. Doeleman, and A. F. Koenderink, *Nanophotonics* **8**, 1513 (2019).
19. D. Yoo, F. de León-Pérez, M. Pelton, I.-H. Lee, D. A. Mohr, M. B. Raschke, J. D. Caldwell, L. Martín-Moreno, and S.-H. Oh, *Nature Photon.* **15**, 125 (2021).
20. I. Liberal and N. Engheta, *Science* **358**, 1540 (2017).
21. N. Kinsey, C. DeVault, A. Boltasseva, and V. M. Shalae, *Nat. Rev. Mater.* **4**, 742 (2019).
22. B. C. Yildiz and H. Caglayan, *Phys. Rev. B* **102**, 165303 (2020).
23. V. Caligiuri, M. Palei, G. Biffi, S. Artyukhin, and R. Krahne, *Nano Lett.* **19**, 3151 (2019).
24. N. Kinsey and J. Khurgin, *Opt. Mater. Express* **9**, 2793 (2019).
25. W. D. Tian, F. Liang, S. M. Chi, C. Li, H. H. Yu, H. Zhang, and H. J. Zhang, *ACS Omega* **5**, 2458 (2020).
26. S. S. Kharintsev, A. V. Kharitonov, A. R. Gazizov, and S. G. Kazarian, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **12**, 3862 (2020).
27. А. Р. Газизов, А. В. Харитонов, С. С. Харинцев, *Письма в ЖЭТФ* **113**, 152 (2021) [*JETP Lett.* **113**, 140 (2021)].
28. J. Kim, A. Dutta, G. V. Naik, A. J. Giles, F. J. Bezares, C. T. Ellis, J. G. Tischler, A. M. Mahmoud, H. Caglayan, O. J. Glembocki, A. V. Kildishev, J. D. Caldwell, A. Boltasseva, and N. Engheta, *Optica* **3**, 339 (2016).
29. B. Huttner and S. M. Barnett, *Phys. Rev. A* **46**, 4306 (1992).
30. H. T. Dung, L. Knöll, and D.-G. Welsch, *Phys. Rev. A* **57**, 3931 (1998).
31. T. Gruner and D.-G. Welsch, *Phys. Rev. A* **53**, 1818 (1996).
32. M. K. Dezfouli and S. Hughes, *ACS Photonics* **4**, 1245 (2017).
33. A. R. Gazizov, M. Kh. Salakhov, and S. S. Kharintsev, *J. Phys.: Conf. Ser.* **2015**, 012044 (2021).
34. M. A. Yurkin and M. Huntemann, *J. Phys. Chem. C* **119**, 29088 (2015).
35. I. V. Lindell, J. C.-E. Sten, and R. E. Kleinman, *J. Electromagnet. Wave.* **8**, 295 (1994).
36. L. G. Cançado, R. Beams, A. Jorio, and L. Novotny, *Phys. Rev. X* **4**, 031054 (2014).
37. A. R. Gazizov and S. S. Kharintsev, in: *15th International Congress on Artificial Materials for Novel Wave Phenomena (Metamaterials)*, IEEE, N.Y. (2021), X-132.
38. C. van Vlack and S. Hughes, *Opt. Lett.* **37**, 2880 (2012).
39. A. Oskooi, D. Roundy, M. Ibanescu, P. Bermel, J. D. Joannopoulos, and S. G. Johnson, *Comp. Phys. Commun.* **181**, 687 (2010).
40. A. R. Gazizov, M. Kh. Salakhov, and S. S. Kharintsev, *Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys.* **86**, S71 (2022).
41. А. В. Харитонов, А. Р. Газизов, С. С. Харинцев, *Письма в ЖЭТФ* **114**, 756 (2021) [*JETP Lett.* **114**, 687 (2021)].



## Устойчивость твердых атомарных фаз азота при нормальном давлении

К. С. Гришаков<sup>1)</sup>, Н. Н. Дегтяренко<sup>+</sup>

<sup>+</sup> Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, 115409 Москва, Россия

\* Научно-исследовательский институт проблем развития научно-образовательного потенциала молодежи, 119620 Москва, Россия

Поступила в редакцию 19 марта 2023 г.

После переработки 27 марта 2023 г.

Принята к публикации 27 марта 2023 г.

В рамках теории функционала плотности для энергонасыщенных твердых атомарных фаз азота, которые предсказываются теорией динамически устойчивыми при нормальном давлении, впервые исследованы вопросы устойчивости к формированию вакансий в объеме структуры и возможность реализации стабильной поверхности. Показано, что фазы с симметриями кристаллической решетки  $P\bar{6}2c$  и  $Pscn$  являются неустойчивыми к формированию вакансий при нормальном давлении. Фазы  $R\bar{3}$  и  $P2_1$  устойчивы к формированию вакансий, однако поверхность таких структур вносит неустойчивость, вызывающую их переход из твердого атомарного метастабильного состояния в молекулярное. Гош фаза азота с симметрией кристаллической решетки  $I2_13$  является устойчивой к рассмотренным структурным возмущениям и является наиболее перспективной для экспериментального синтеза при нормальном давлении.

DOI: 10.31857/S1234567823090069, EDN: botyvt

**Введение.** Кристаллические структуры, состоящие из атомов азота, соединенных друг с другом одинарными и/или двойными связями, представляют большой интерес в качестве кандидатов на роль материалов с высокой плотностью запасаемой энергии (HEDM – англ. *High energy density material*). Теоретические оценки запасаемой энергии азотных структур с одинарными связями между атомами дают значения порядка 1.3–1.4 эВ/атом [1]. Причем процесс энерговыделения является экологически безвредным, поскольку продуктом распада таких структур являются молекулы азота, являющиеся основным компонентом атмосферы Земли.

К настоящему моменту экспериментально при высоком давлении ( $> 120$  ГПа) удалось получить различные твердые атомарные фазы азота [2–7]. Среди всех синтезированных атомарных азотных кристаллических фаз наибольший интерес с точки зрения использования в качестве HEDM представляет гош фаза азота, имеющая симметрию кристаллической  $I2_13$ , поскольку данная фаза сохраняет стабильное состояние при декомпрессии до самых низких давлений  $\sim 50$  ГПа [6, 7]. Несмотря на активные экспериментальные исследования пока не удалось синтезировать твердые атомарные азотные структуры, которые были бы устойчивы при нор-

мальном давлении. Поэтому вопрос о возможности создания при нормальном давлении веществ с высоким значением плотности запасенной энергии на основе атомарных азотных структур остается актуальным.

В рамках *ab initio* расчетов было предсказано множество различных твердых атомарных фаз азота [1, 8–20]. Кроме того, в работе [21] рассматривается азотная фаза, подобная структуре моногидрида алмаза (*diamond monohydride* [22]). Особенностью данной фазы является то, что в области нормального давления энергетически она сопоставима с гош фазой азота, что не характерно для других твердых атомарных азотных структур, энергия которых минимум на 0.1 эВ/атом выше по сравнению с гош фазой азота. Работа [21] в большей степени посвящена углеродным структурам, поэтому детальным исследований свойств данной азотной фазы, в том числе расчетов фоновых спектров и анализа динамической устойчивости при различных давлениях не проводилось. Теоретический анализ фоновых спектров при нулевой температуре в рамках теории функционала плотности показывает, что критерий динамической устойчивости (отсутствие мнимых частот в фоновом спектре) при нормальном давлении выполняется для твердых атомарных фаз азота с симметри-

<sup>1)</sup>e-mail: ksgrishakov@mephi.ru

ями кристаллической решетки  $I2_13$ ,  $Pccn$ ,  $R\bar{3}$ ,  $P\bar{6}2c$  и  $P2_1$  [1].

Возникает некоторое противоречие между экспериментальными и теоретическими результатами: теория предсказывает достаточно большое число различных твердых атомарных фаз азота, устойчивых при нормальном давлении, в то время как экспериментально удержать азот в атомарном состоянии при давлениях ниже 50 ГПа не получается. Здесь важно отметить, что в рамках теории устойчивость атомарных азотных структур определялась по отсутствию мнимых частот на спектре фононов, рассчитанном при нулевой температуре, что не дает никакой информации о степени устойчивости этих фаз при конечных температурах, а также устойчивости к различным отклонениям от идеальной периодичности решетки, таким как поверхность и точечные дефекты кристаллической решетки, которые присущи всем твердым телам. Оценка времени жизни структуры при конечной температуре в рамках теоретических расчетов обычно проводится на основе молекулярно динамического моделирования с последующим применением формулы Аррениуса для экстраполяции результатов в область температур, при которых система может быть устойчива достаточно большое время, недоступное для моделирования из-за соответствующего увеличения времени счета [23–26]. Одним из недостатков такого подхода является необходимость набора большой статистики из молекулярно-динамических расчетов при различных температурах для суперъячеек, содержащих достаточно большое количество атомов ( $> 100$ ). В рамках теории функционала плотности такие расчеты требуют больших компьютерных ресурсов и долгого времени счета. Поэтому такая методика обычно применяется в рамках существенно более простых подходов, например, в модели сильной связи [23–26]. В настоящий момент не существует модели сильной связи, параметры которой подобраны для адекватного описания твердых атомарных фаз азота. Одним из перспективных направлений расчета больших систем являются современные алгоритмы с машинно-обучаемыми потенциалами межатомного взаимодействия, позволяющие существенно ускорить расчеты [27]. Для большого семейства твердых атомарных азотных структур, имеющих существенно разную структуру и электронные свойства, необходимы отдельные большие исследования на возможность получения потенциала межатомного взаимодействия, адекватно и единообразно описывающего эти структуры и такие сложные процессы как переход из стабильного состояния в метастабильное

при изменении давления, а также их распад. Вопросы же устойчивости к формированию точечных дефектов и стабильности поверхности при нормальном давлении для твердых атомарных фаз азота ранее не исследовались.

Целью данной работы является изучение возможности разрушения метастабильного состояния азотных кристаллов за счет структурных дефектов, нарушающих идеальную периодичность кристаллической решетки, и которые присущи всем твердым телам. Рассматриваются вопросы стабильности поверхности твердых атомарных фаз азота, а также устойчивость к формированию вакансий в объеме, как термодинамически равновесных ветвей возбуждения кристалла.

**Методика расчета.** Расчеты энергетических и структурных свойств твердых атомарных фаз азота при различных значениях давления проводились в рамках теории функционала плотности с использованием базиса плоских волн в программе Quantum ESPRESSO v. 6.7 [28, 29]. При проведении расчетов использовались обменно-корреляционный функционал PBEsol и сохраняющий норму псевдопотенциал [30], энергия обрезания составляла 90 Ry. В обратном пространстве использовалась сетка с расстоянием между точками, меньшим  $0.025 \text{ \AA}^{-1}$  по каждой из координат.

При расчетах устойчивости твердых атомарных фаз азота к формированию вакансий из элементарных ячеек, которые изображены на рис. 1, создавались суперъячейки, имеющие следующие размеры:  $3 \times 3 \times 3$  для фазы  $I2_13$  (216 атомов);  $3 \times 2 \times 2$  для фазы  $P2_1$  (192 атома);  $3 \times 3 \times 3$  для фазы  $R\bar{3}$  (324 атома);  $3 \times 3 \times 4$  для фазы  $P\bar{6}2c$  (288 атомов);  $2 \times 3 \times 2$  для фазы  $Pccn$  (384 атома).

Вычисление энтальпии формирования вакансии проводилось по формуле:

$$H_{\text{form}} = H_{\text{def}} - (N - 1)H_{\text{ideal}}/N, \quad (1)$$

где  $H_{\text{def}}$  – энтальпия отрелаксированной структуры с вакансией;  $H_{\text{ideal}}$  – энтальпия идеальной решетки;  $N$  – полное число атомов азота в идеальной структуре. В рамках модели независимых случайных вакансий для оценки их равновесной концентрации  $C_{\text{vac}}$  при различных значениях температуры  $T$  используется формула:

$$C_{\text{vac}} = \exp(-H_{\text{form}}/k_B T). \quad (2)$$

В случае, когда размещение вакансий в геометрически неэквивалентных атомных положениях кристаллической решетки дает различные значения  $H_{\text{form}}(i)$

( $i$  – индекс, отвечающий различным положениям вакансии), то для расчета равновесной концентрации вакансий для рассматриваемой суперъячейки будем использовать формулу:

$$C_{\text{vac}} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \exp(-H_{\text{form}}(i)/k_B T), \quad (3)$$

где  $m$  – число неэквивалентных размещений вакансии.

Для моделирования поверхности кристаллических азотных структур использовались суперъячейки  $3 \times 3 \times 2$  для фаз  $P2_1$  и  $R\bar{3}$ , и  $3 \times 3 \times 4$  для фазы  $I2_13$ , что связано с меньшим размером элементарной ячейки фазы  $I2_13$  как по величине, так и по числу атомов. При создании модели поверхности в направлении оси  $Z$  создавался вакуум размером  $15 \text{ \AA}$ , при этом несколько нижних слоев атомов азота в направлении оси  $Z$ , не граничащих с вакуумом, считались фиксированными.

**Результаты.** Объектами исследований в данной работе выбраны твердые атомарные фазы азота с симметриями кристаллической решетки  $I2_13$ ,  $Pcscn$ ,  $R\bar{3}$ ,  $P\bar{6}2c$  и  $P2_1$ , поскольку согласно литературным данным среди всего многообразия теоретически исследованных чисто азотных структур только для них имеются расчеты, демонстрирующие динамическую устойчивость при нормальном давлении. Для твердых атомарных фаз азота  $I2_13$ ,  $Pcscn$ ,  $R\bar{3}$ ,  $P\bar{6}2c$  и  $P2_1$ , элементарные ячейки которых изображены на рис. 1, при наличии одной вакансии на суперъячейку (размеры суперъячеек приведены в разделе Методи-

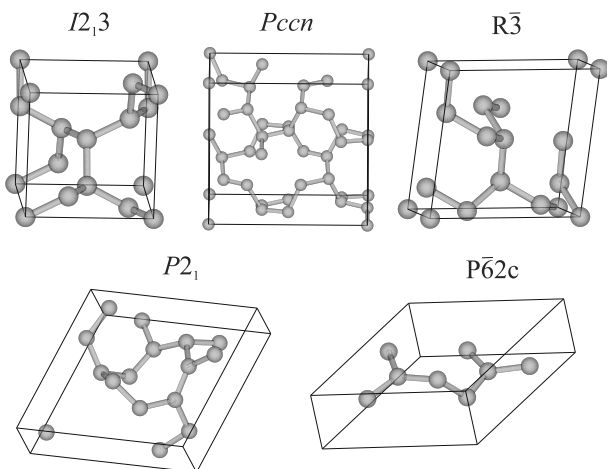


Рис. 1. (Цветной онлайн) Элементарные ячейки твердых атомарных фаз азота  $I2_13$ ,  $Pcscn$ ,  $R\bar{3}$ ,  $P2_1$  и  $P\bar{6}2c$ , которые согласно теоретическим расчетам являются динамически устойчивыми при нормальном давлении [1]

ка расчета) и нормальном давлении была проведена процедура релаксации атомных координат и геометрии суперъячеек. Установлено, что структура с симметрией кристаллической решетки  $Pcscn$  выводится из метастабильного состояния введением одиночной вакансии на 384 атома суперъячейки, переходя в молекулярную фазу, образованную двухатомными молекулами азота. Остальные рассматриваемые азотные структуры сохраняют твердое атомарное состояние. На рисунке 2 представлены зависимости энthal-

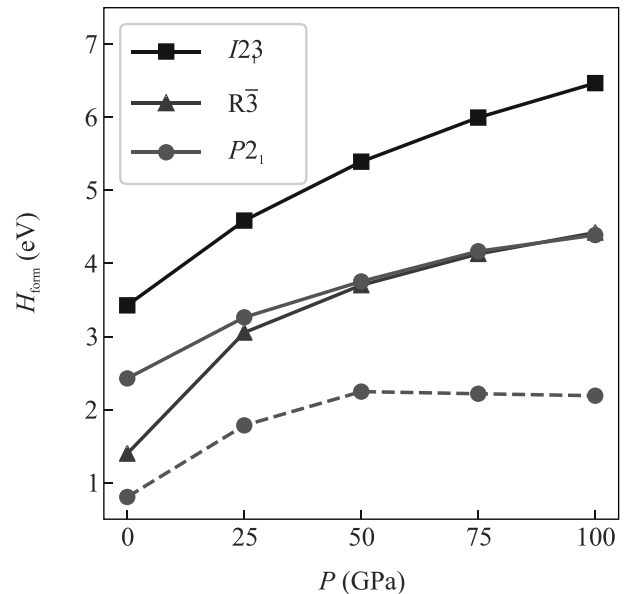


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость энthalпии формирования вакансии от давления для твердых атомарных фаз азота с симметриями кристаллической решетки  $I2_13$  (черная линия),  $R\bar{3}$  (синяя линия),  $P2_1$  (красная линия). Для структуры  $P2_1$  из-за большого числа неэквивалентных положений вакансии приводится минимальное (пунктирная линия) и максимальное (сплошная линия) значения энthalпии формирования

пии формирования вакансии, рассчитанные по формуле (1), для кристаллических структур  $I2_13$ ,  $R\bar{3}$  и  $P2_1$ . Для фаз  $I2_13$  и  $R\bar{3}$  энthalпия формирования вакансии одинакова при размещении вакансии на месте любого атома структуры, что связано с высокой симметрией идеальной кристаллической решетки данных азотных фаз. Для низко-симметричной фазы  $P2_1$  энthalпия формирования вакансий оказывается различной для всех геометрически неэквивалентных положений вакансии. Поскольку минимальные значения  $H_{\text{form}}$  для фазы  $P2_1$  достаточно велики так, что равновесная концентрация вакансий при температурах порядка комнатной практически равна нулю, то на рис. 2 приводятся только макси-

мальное и минимальное значения  $H_{\text{form}}$  при различных давлениях без уточнения конкретного статистического распределения между этими значениями. С ростом давления энтальпия формирования вакансий увеличивается, и, следовательно, образование вакансий становится менее выгодным. На рисунке 3 изображены зависимости равновесной концентрации вакансий от температуры для твердых атомарных фаз азота с симметриями кристаллической решетки  $I2_13$  (черная линия),  $R\bar{3}$  (синяя линия),  $P2_1$  (красная линия).

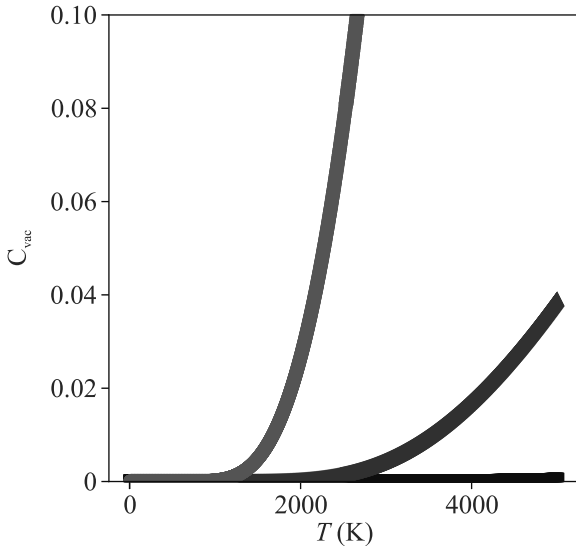


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость равновесной концентрации вакансий от температуры для твердых атомарных фаз азота с симметриями кристаллической решетки  $I2_13$  (черная линия),  $R\bar{3}$  (синяя линия),  $P2_1$  (красная линия)

ражены зависимости равновесной концентрации вакансий для твердых атомарных фаз азота  $I2_13$ ,  $R\bar{3}$  и  $P2_1$ , рассчитанные согласно формулам (2) и (3). При температурах, меньших 2000 К, равновесная концентрация вакансий для всех этих азотных структур не превышает 2%. Таким образом, кристаллические фазы азота  $I2_13$ ,  $R\bar{3}$  и  $P2_1$  можно считать устойчивыми к формированию вакансий при нормальном давлении. Причем формирование вакансий в данных структурах при температурах порядка комнатной является очень маловероятным процессом.

При нормальном давлении для фазы  $P\bar{6}2c$  из восьми геометрически неэквивалентных положений вакансии семь дают значение  $H_{\text{form}} = 1.56$  эВ и одно положение дает значение  $H_{\text{form}} = -0.01$  эВ. Таким образом, для фазы  $P\bar{6}2c$  существуют положения вакансий в решетке, которые оказываются энергетически выгодными. Концентрация этих вакансий будет составлять 1/8 часть (или 12.5%) от количества атомов в объеме решетки. Обычно считается, что критическая концентрация вакансий, при которой происходит разрушение материала составляет 10% [31].

Поэтому можно говорить о том, что твердая атомарная фаза  $P\bar{6}2c$  будет неустойчива к формированию вакансий при нормальном давлении. При увеличении давления до 40 ГПа минимальное значение  $H_{\text{form}}$  для фазы  $P\bar{6}2c$  составляет 1.21 эВ, т.е. с ростом давления данная структура становится устойчивой к формированию вакансий.

Поскольку наибольший практический интерес представляют твердые атомарные фазы азота, способные сохранять метастабильное состояние при нормальном давлении, то дальнейшие исследования устойчивости поверхности проводились только для структур  $I2_13$ ,  $R\bar{3}$  и  $P2_1$ . На рисунках 4 и 5а изображены модели поверхностей твердых атомарных фаз азота:

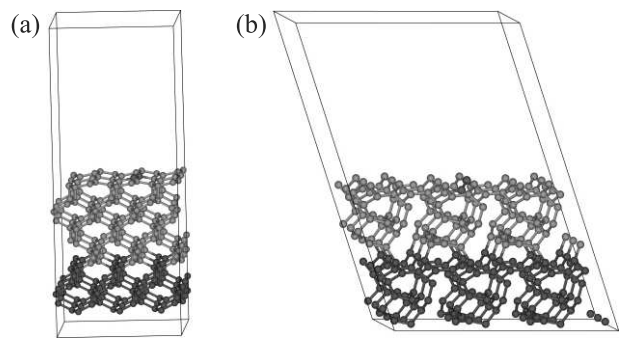


Рис. 4. (Цветной онлайн) Модели поверхностей твердых атомарных фаз азота: (a) –  $I2_13$ ; (b) –  $P2_1$ . Красным цветом отмечены атомы, координаты которых считаются фиксированными при проведении процедуры геометрической оптимизации поверхности. Зеленым цветом отмечены атомы, которые после оптимизации поверхности удаляются на большое расстояние от нее для моделирования процесса выхода атомов с поверхности структуры в вакуум с образованием молекулы  $N_2$

ражены модели поверхностей рассматриваемых атомарных кристаллических азотных фаз. Для изображенных на рис. 4 и 5а структур проводилась процедура оптимизации атомных координат при фиксированной геометрии ячейки. Красным цветом на рис. 4 и 5а изображены атомы азота, координаты которых считаются фиксированными.

В результате проведения процедуры геометрической оптимизации модели поверхности фазы  $R\bar{3}$  происходит разрушение твердого атомарного состояния с переходом нефиксированных атомов азота в молекулярную фазу, состоящую из двухатомных молекул (см. рис. 5b). Таким образом, в случае атомарной кристаллической фазы  $R\bar{3}$  поверхность вносит неустойчивость, приводящую к разрушению метастабильного состояния данной фазы при нормальном давлении.

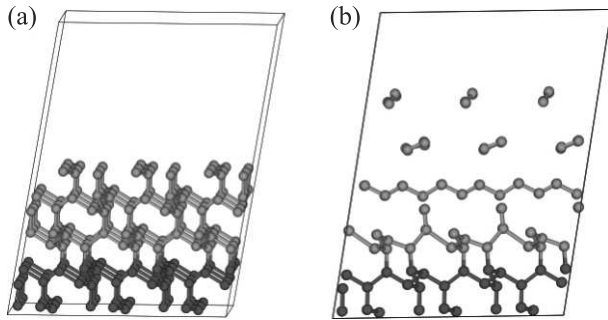


Рис. 5. (Цветной онлайн) (а) – Модель поверхности твердой атомарной фазы азота  $R\bar{3}$ . (б) – Распад структуры  $R\bar{3}$  на молекулы азота  $N_2$  в процессе геометрической оптимизации поверхности, изображенной на рис. 5а. Красным цветом отмечены атомы, координаты которых считаются фиксированными при проведении процедуры геометрической оптимизации поверхности

Геометрическая оптимизация модели поверхности для фаз  $I2_13$  и  $P2_1$  не приводит к разрушению структуры. Поэтому в качестве следующего шага мы рассмотрели элементарный процесс выхода молекулы  $N_2$  с поверхности азотных кристаллических фаз  $I2_13$  и  $P2_1$  в вакуум. Процедура моделирования такого процесса заключалась в том, что два соседних атома поверхности (зеленые атомы на рис. 4) удалялись с поверхности на достаточно большое расстояние от нее ( $\geq 5 \text{ \AA}$ ) с образованием молекулы  $N_2$ . После этого проводилась процедура оптимизации геометрии новой структуры.

Геометрическая оптимизация структуры поверхности фазы  $P2_1$  с учетом выхода молекулы  $N_2$  в вакуум приводит к проявлению неустойчивости, которая в процессе оптимизации приводит к развалу структуры на двухатомные молекулы  $N_2$ . Аналогичная процедура для поверхности фазы  $I2_13$  приводит лишь к частичной дестабилизации поверхности, сопровождающейся выходом соседних атомов азота в вакуум с образованием еще двух молекул  $N_2$  (см. рис. 6). Из-за использования периодических граничных условий в модели подобный процесс будет происходить по всему верхнему поверхностному слою фазы  $I2_13$  в случае отрыва одной молекулы азота.

**Закключение.** В данной работе проведено исследование устойчивости при нормальном давлении метастабильных атомарных кристаллических структур с одинарными связями между атомами к различным структурным дефектам, нарушающим идеальную периодичность, таким как вакансии и поверхность. Данные критерии устойчивости применительно к твердым атомарным фазам азота ранее в теоретических работах не рассматривались. Этот

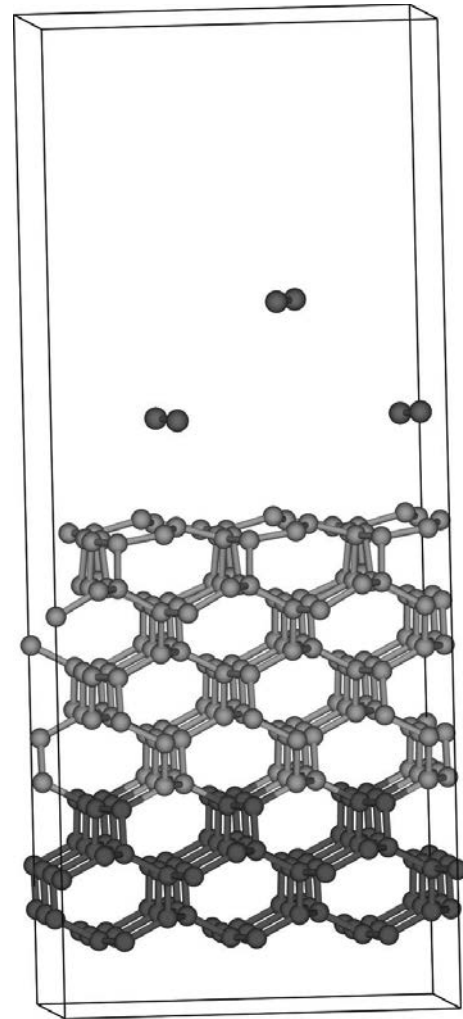


Рис. 6. (Цветной онлайн) Модель поверхности фазы  $I2_13$ , после геометрической оптимизации начального состояния с выведенной с поверхности в вакуум молекулой  $N_2$ . Красным цветом отмечены атомы, координаты которых считаются фиксированными при проведении процедуры геометрической оптимизации поверхности

естественный подход к оценке устойчивости можно в дальнейшем использовать и для других веществ. Подобные твердые атомарные фазы азота являются перспективными в качестве материалов с высокой плотностью запасаемой энергии. Были выбраны структуры с симметриями кристаллической решетки  $I2_13$ ,  $Pccn$ ,  $R\bar{3}$ ,  $P\bar{6}2c$  и  $P2_1$ , поскольку в ранее проведенных работах [1] в рамках расчетов в теории функционала плотности было показано, что они являются динамически устойчивыми при нормальном давлении. Проведенные расчеты показали, что для твердой атомарной фазы  $Pccn$  введение вакансий (концентрация меньше 0.3%) приводит к выводу струк-

туры из метастабильного состояния, который сопровождается ее переходом в глобальный минимум, отвечающий молекулярной фазе, образованной молекулами  $N_2$ . Для фазы  $P\bar{6}2c$  при нормальном давлении существуют положения вакансий, для которых энтальпия формирования оказывается отрицательной. Это говорит об энергетической выгоде образования вакансий в данных положениях. Концентрация таких вакансий превышает 10 %, что считается достаточным для разрушения материала [31]. Таким образом, можно говорить о том, что локальные минимумы на поверхности потенциальной энергии, соответствующие метастабильным состояниям фаз  $Pc2n$  и  $P\bar{6}2c$ , являются неглубокими, и система легко выводится из них малыми структурными возмущениями даже при низких температурах, порядка гелиевых. Остальные рассматриваемые твердые атомарные фазы азота являются устойчивыми к формированию вакансий, причем соответствующие значения энтальпии формирования достаточно велики. Оценка концентрации дефектов в рамках модели независимых случайных вакансий показывает, что при комнатной температуре образование вакансий в таких кристаллах маловероятно.

Для устойчивых к образованию вакансий азотных структур были построены модели поверхностей. Для фазы  $R\bar{3}$  поверхность – нестабильна и геометрическая релаксация поверхности в рамках теории функционала плотности при  $T = 0$  К приводит к переходу фазы в молекулярное состояние. Для структуры с симметрией кристаллической решетки  $P2_1$  поверхность стабилизируется, но рассмотрение элементарного процесса выхода двух соседних атомов азота с поверхности в вакуум с образованием молекулы  $N_2$  приводит к неустойчивости, приводящей к переходу структуры в молекулярную фазу.

Единственная из рассмотренных нами структур, которая не выводится из метастабильного состояния рассмотренными структурными возмущениями является гош фаза азота с симметрией кристаллической решетки  $I2_13$ . Стоит отметить, что данная фаза наблюдалась экспериментально под давлением, и сохраняла устойчивость при декомпрессии до  $\sim 50$  ГПа [6, 7]. В то же время, с точки зрения теории она является наиболее энергетически выгодной по сравнению с другими твердыми атомарными азотными фазами в области относительно низких для подобных структур давлений ( $< 100$  ГПа) [1]. Поверхность данной фазы в рамках геометрической релаксации – стабилизируется, а выход двух соседних атомов азота с поверхности в вакуум с образованием молекулы  $N_2$  приводит к слабой неустойчивости, сопровож-

дающейся дополнительным выходом еще 4 соседних атомов азота с поверхности в вакуум с образованием двух молекул  $N_2$ . В принципе, такой процесс может быть катализатором распада структуры при нормальном давлении. Поэтому для экспериментального получения гош фазы азота при нормальном давлении вопрос стабилизации поверхности может играть важную роль.

Наряду с твердыми атомарными чисто азотными структурами перспективным направлением прикладных и фундаментальных исследований являются соединения, богатые азотом, содержащие один или несколько атомов другого сорта. В настоящее время активно развивается тематика полинитридов различных металлов [32–36]. Такие соединения как  $K_2N_6$  и  $K_9N_{56}$  сохраняли на эксперименте свое метастабильное состояние вплоть до давлений порядка 20–30 ГПа [35, 36], что ниже чем лучший результат, достигнутый в области чисто азотных твердых атомарных структур.

Также существенное внимание уделяется различным азотным кластерам, допированным атомом металла [37–39], а также молекулам, содержащим полиазотные кольца [37, 40, 41]. Важным направлением развития соединений, богатых азотом, являются соединения, содержащие две и более азидные группы, т.е. имеющие конфигурацию  $M(N_3)_n$ , где  $M$  – атом или группа атомов, отличных от азота. В настоящее время синтезировано большое количество подобных соединений [42–44], в том числе гексаазидобензол  $C_6(N_3)_6$  [44] и тетраазидометан  $C(N_3)_4$  [43], которые характеризуются высокой положительной теплотой образования, напрямую связанной с большим количеством одинарных и двойных N–N связей. Данные исследования не требуют использования высоких давлений, что значительно упрощает проведение экспериментальных работ.

Однако стоит отметить, что запасаемая энергия в чисто азотных структурах оказывается выше, чем в соединениях с высоким содержанием азота. Так по проведенным нами теоретическим оценкам в теории функционала плотности значение запасаемой энергии молекулы  $C_6(N_3)_6$ , претендующей на ростль HEDM, согласно гипотетической реакции  $C_6(N_3)_6 + 3N_2 \rightarrow C_6H_6 + 9N_2$ , получается равным  $\approx 0.67$  эВ/атом. Аналогичная оценка для высокоэнергетической молекулы  $C(N_3)_4$  согласно гипотетической реакции  $C(N_3)_4 + 2N_2 \rightarrow CH_4 + 6N_2$  дает значение запасаемой энергии порядка 0.8 эВ/атом. Эти значения запасаемой энергии более чем в 1.5 ниже аналогичных теоретических оценок для чисто азотных твердых атомарных структур. Поэтому, ис-

ходя из результатов данной работы, поиск возможных вариантов решения вопроса о стабилизации поверхности твердых атомарных фаз азота является также актуальным и важным. Одним из возможных вариантов решения вопроса о стабилизации поверхности может быть использование пространственного ограничения фазы внутри, например, углеродных нанотрубок [45].

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда #21-72-00017.

К. С. Гришаков выражает благодарность Автономной некоммерческой организации Научно-исследовательскому институту Проблем развития научно-образовательного потенциала молодежи за предоставленные вычислительные ресурсы и всестороннюю поддержку исследования.

1. K. S. Grishakov and N. N. Degtyarenko, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **24**, 8351 (2022).
2. Y. Ma, A. R. Oganov, Z. Li, Y. Xie, and J. Kotakoski, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 065501 (2009).
3. D. Laniel, B. Winkler, T. Fedotenko, A. Pakhomova, S. Chariton, V. Milman, V. Prakapenka, L. Dubrovinsky, and N. Dubrovinskaya, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 216001 (2020).
4. D. Tomasino, M. Kim, J. Smith, and C.-S. Yoo, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 205502 (2014).
5. D. Laniel, G. Geneste, G. Weck, M. Mezouar, and P. Loubeyre, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 066001 (2019).
6. M. I. Eremets, A. G. Gavriluk, N. R. Serebryanaya, I. A. Trojan, D. A. Dzivenko, R. Boehler, H. K. Mao, and R. J. Hemley, *J. Chem. Phys.* **121**, 11296 (2004).
7. M. I. Eremets, A. G. Gavriluk, I. A. Trojan, D. A. Dzivenko, and R. Boehler, *Nat. Mater.* **3**, 558 (2004).
8. C. Mailhot, L. H. Yang, and A. K. McMahan, *Phys. Rev. B* **46**, 14419 (1992).
9. F. Zahariev, J. Hooper, S. Alavi, F. Zhang, and T. K. Woo, *Phys. Rev. B* **75**, 140101(R) (2007).
10. J. Kotakoski and K. Albe, *Phys. Rev. B* **77**, 144109 (2008).
11. M. M. G. Alemany and J. L. Martins, *Phys. Rev. B* **68**, 024110 (2003).
12. W. D. Mattson, D. Sanchez-Portal, S. Chiesa, and R. M. Martin, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 125501 (2004).
13. F. Zahariev, A. Hu, J. Hooper, F. Zhang, and T. Woo, *Phys. Rev. B* **72**, 214108 (2005).
14. A. R. Oganov and C. W. Glass, *J. Chem. Phys.* **124**, 244704 (2006).
15. K. Grishakov, K. Katin, M. Gimaldinova, and M. Maslov, *Letters on Materials* **9**, 366 (2019).
16. J. Sun, M. Martinez-Canales, D. D. Klug, C. J. Pickard, and R. J. Needs, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 175502 (2013).
17. A. A. Adeleke, M. J. Greschner, A. Majumdar, B. Wan, H. Liu, Z. Li, H. Gou, and Y. Yao, *Phys. Rev. B* **96**, 224104 (2017).
18. S. V. Bondarchuk and B. F. Minaev, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 6698 (2017).
19. K. S. Grishakov and N. N. Degtyarenko, *JETP Lett.* **112**, 630 (2020).
20. K. S. Grishakov and N. N. Degtyarenko, *JETP Lett.* **115**, 422 (2022).
21. M. V. Kondrin and V. V. Brazhkin, *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics* **7**, 44 (2016).
22. M. V. Kondrin and V. V. Brazhkin, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17**, 17739 (2015).
23. M. M. Maslov and K. P. Katin, *Chem. Phys. Lett.* **644**, 280 (2016).
24. M. M. Maslov, K. P. Katin, A. I. Avkhadiyeva, and A. I. Podlivaev, *Russ. J. Phys. Chem. B* **8**, 152 (2014).
25. K. P. Katin and M. M. Maslov, *Molecular Simulation* **44**, 703 (2018).
26. K. P. Katin, V. S. Prudkovskiy, and M. M. Maslov, *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures* **81**, 1 (2016).
27. I. S. Novikov, K. Gubaev, E. V. Podryabinkin, and A. V. Shapeev, *Machine Learning: Science and Technology* **2**, 025002 (2021).
28. P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, and D. Ceresoli, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 395502 (2009).
29. P. Giannozzi, O. Andreussi, T. Brumme, O. Bunau, M. B. Nardelli, M. Calandra, and R. Car, *J. Phys.: Condens. Matter* **29**, 465901 (2017).
30. D. R. Hamann, *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.* **88**, 085117 (2013).
31. Q. S. Mei and K. Lu, *Philosophical Magazine Letters* **88**, 203 (2008).
32. Q. Wei, C. Zhao, M. Zhang, H. Yan, and B. Wei, *Phys. Lett. A* **383**, 2429 (2019).
33. Z. Liu, D. Li, Q. Zhuang, F. Tian, D. Duan, F. Li, and T. Cui, *Commun. Chem.* **3**, 42 (2020).
34. N. P. Salke, K. Xia, S. Fu, Y. Zhang, E. Greenberg, V. B. Prakapenka, J. Liu, J. Sun, and J.-F. Lin, *Phys. Rev. Lett.* **126**, 065702 (2021).
35. Y. Wang, M. Bykov, I. Chepkasov, A. Samtsevich, E. Bykova, X. Zhang, S. Jiang, E. Greenberg, S. Chariton, V. B. Prakapenka, A. R. Oganov, and A. F. Goncharov, *Nat. Chem.* **14**, 794 (2022).
36. D. Laniel, F. Trybel, Y. Yin, T. Fedotenko, S. Khandarkhaeva, and A. Aslandukov, *Nat. Chem.* (2023).
37. L. Gagliardi and P. Pyykkö, *J. Am. Chem. Soc.* **123**, 9700 (2001).
38. M. Straka and P. Pyykkö, *Inorg. Chem.* **42**, 8241 (2003).
39. K. Ding, X. Li, H. Xu, T. Li, Z. Ge, Q. Wang, and W. Zheng, *Chem. Sci.* **6**, 4723 (2015).

40. L. Gagliardi and P. Pyykkö, *Theoretical Chemistry Accounts: Theory, Computation, and Modeling (Theoretica Chimica Acta)* **110**, 205 (2003).
41. M. Straka, *Chem. Phys. Lett.* **358**, 531 (2002).
42. M.-H. V. Huynh, M. A. Hiskey, E. L. Hartline, D. P. Montoya, and R. Gilardi, *Angew. Chem.* **116**, 5032 (2004).
43. K. Banert, Y.-H. Joo, T. Ruffer, B. Walfort, and H. Lang, *Angewandte Chemie International Edition* **46**, 1168 (2007).
44. S. V. Chapyshev, *Russian Chemical Bulletin* **60**, 1274 (2011).
45. M. Benchafia, Z. Yao, G. Yuan, T. Chou, H. Piao, X. Wang, and Z. Iqbal, *Nat. Commun.* **8**, 930 (2017).



## Динамическая восприимчивость скирмионного кристалла

В. Е. Тимофеев<sup>+\*×1</sup>), Д. Н. Аристов<sup>+\*</sup>

<sup>+</sup>Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Петербургский институт ядерной физики, 188300 Гатчина Россия

<sup>\*</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, 199034 С.-Петербург, Россия

<sup>×</sup>Санкт-Петербургский электротехнический университет “ЛЭТИ”, 197376 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 20 декабря 2022 г.

После переработки 19 марта 2023 г.

Принята к публикации 6 апреля 2023 г.

В подходе стереографической проекции разработан теоретический формализм расчета тензора динамической магнитной восприимчивости скирмионного кристалла (СкК), возникающего в тонких ферромагнитных пленках с взаимодействием Дзялошинского–Мории во внешнем магнитном поле. Там, где это возможно используется аналитический подход, для построения статической конфигурации СкК используется модельный анзац, после чего рассматриваются малые флуктуации вокруг него. Полученные выражения численно анализируются для случая однородной восприимчивости, наиболее важного для экспериментов по магнитному резонансу (МР). Предсказано, что помимо трех обсуждаемых ранее в литературе, а также наблюдаемых экспериментально, резонансов, должны наблюдаться дополнительные резонансы меньшей интенсивности на больших частотах.

DOI: 10.31857/S1234567823090070, EDN: boxhqa

**Введение.** Магнитные скирмионы – топологически защищенные конфигурации локальной намагниченности, возникающие, например, в нецентросимметричных магнетиках [1] в присутствии взаимодействия Дзялошинского–Мории (ДМ). Скирмионы привлекают внимание исследователей благодаря возможности их использования в качестве элементов новых устройств компьютерной памяти [2], арифметико-логических устройств [3], или даже искусственных нейронных сетей [4]. Известно, что скирмионы обычно упорядочиваются в регулярные решетки как в объемных образцах [5], так и в тонких пленках [6–9]. Решетки скирмионов, также называемые скирмионными кристаллами (СкК), интересны в контексте применения в магноники [10].

Один скирмион представляет собой цилиндрическую доменную стенку малого радиуса, чье движение описывается уравнением Тила [11]. Но даже один скирмион представляет собой сложную структуру, чья динамика не может описываться только в терминах смещений. Исследовались также деформации формы скирмиона такие, как дилатации, эллиптические деформации, треугольные и т.д. [12, 13]

Ранее было показано, что среди возбуждений СкК есть голдстоуновская мода [14], связанная со смещениями скирмионных центров в решетке. Кроме

этой моды, существуют и другие возбуждения разной симметрии [10, 15, 16], отвечающие эллиптическим деформациям, вращению по часовой стрелке (CW), против часовой стрелки (CCW), дыхательной моде (Vg) скирмионов.

Наблюдать и исследовать возбуждения СкК можно при помощи различных экспериментальных методов, например, неупругого рассеяния нейтронов [17], магнитооптического обратного эффекта Фарадея [18], магнитного резонанса (МР). При помощи последнего метода было показано [19], что CW и CCW моды наблюдаются в случае, когда осциллирующая компонента магнитного поля лежит в плоскости СкК, а дыхательная мода проявляет себя, когда поле колеблется в направлении, перпендикулярном плоскости СкК, как и было предсказано, с помощью численного моделирования [15].

Также было показано, что октагональная и секстипольная моды могут проявлять себя в МР экспериментах в объемных материалах со СкК, в которых сильна кубическая магнитокристаллическая анизотропия, приводящая к гибридизации этих мод с Vg и CCW модами [20, 21].

В настоящей работе мы обсуждаем МР отклик СкК, образующегося в тонких пленках с взаимодействием ДМ во внешнем магнитном поле при низких температурах. Мы показываем, что, помимо низкоэнергетических CW, CCW и Vg мод, существуют мо-

<sup>1</sup>)e-mail: vetimofeev@etu.ru

ды той же симметрии выше по энергии, которые также должны проявлять себя в МР, несмотря на то, что величина таких резонансов существенно меньше.

**Модель.** Рассмотрим тонкую ферромагнитную пленку с взаимодействием ДМ в однородном магнитном поле  $B$ , перпендикулярном пленке. Плотность энергии такой пленки дается следующим выражением:

$$\mathcal{E} = \frac{C}{2} \partial_\mu S_i \partial_\mu S_i - D \epsilon_{\mu ij} S_i \partial_\mu S_j - BS_3, \quad (1)$$

где  $C$  и  $D$  – обменные и ДМ константы соответственно. Видимо, это минимальная модель, в которой существует СкК (за исключением centrosymmetric фрустрированных магнетиков, см., например, [22, 23]). Мы не учитываем диполь-дипольное взаимодействие, поскольку для тонкой пленки в длинноволновом пределе оно может быть, с хорошей точностью, заменено анизотропией типа “легкая плоскость”. Известно, что если величина анизотропии существенно меньше величины внешнего магнитного поля, фазовая диаграмма слабо меняется [24, 25], поэтому такого рода слагаемые мы также не рассматриваем.

Мы исследуем предел низких температур, когда локальная намагниченность достигает насыщения  $\mathbf{S} = S\mathbf{n}$ , где  $|\mathbf{n}| = 1$ . В этом случае удобно измерять длину в единицах  $l = C/D$ , а плотность энергии в единицах  $CS^2l^{-2} = S^2D^2/C$ . При таком выборе единиц измерения плотность энергии (1) зависит только от одного безразмерного параметра  $b = BC/SD^2$ . Оказывается, что в диапазоне полей  $0.25 < b < 0.8$  равновесной статической конфигурацией  $\mathbf{n}$  является СкК, ранее этот вопрос широко обсуждался в литературе [12, 26–28].

Сначала мы обсудим общий формализм вычисления восприимчивости, применимый для произвольной топологически нетривиальной конфигурации намагниченности, а затем используем этот формализм для частного случая СкК [29]. В подходе стереографической проекции единичный вектор, указывающий направление локальной намагниченности  $\mathbf{n}$ , может быть представлен как:

$$n_1 + in_2 = \frac{2f}{1 + f\bar{f}}, \quad n_3 = \frac{1 - f\bar{f}}{1 + f\bar{f}}, \quad (2)$$

где  $f = f(z, \bar{z})$  – функция комплексного переменного  $z = x + iy$  и комплексно сопряженного ему  $\bar{z} = x - iy$ , а  $x, y$  – пространственные координаты. Выражение для  $\mathcal{E}$  существенно нелинейно в терминах  $f, \bar{f}$ , и обсуждалось ранее, например, в [29].

Мы исследуем динамику локальной намагничен-

ности в лагранжевом формализме,  $\mathcal{L} = \mathcal{T} - \mathcal{E}$ , с кинетическим слагаемым вида:

$$\mathcal{T} = \frac{S}{\gamma_0} (1 - \cos \theta) \dot{\varphi}, \quad (3)$$

где углы  $\varphi$  и  $\theta$  определяют направление намагниченности  $\mathbf{n} = (\cos \varphi \sin \theta, \sin \varphi \sin \theta, \cos \theta)$ . Такой кинетический член приводит к уравнению Ландау–Лифшица,  $\dot{\mathbf{S}} = -\gamma_0 \mathbf{S} \times \mathbf{H}$ , где  $\gamma_0$  – гиромагнитное отношение, а  $\mathbf{H} = \delta E / \delta \mathbf{S}$  – эффективное магнитное поле.

Множитель  $S/\gamma_0$  может быть внесен в определение единиц измерения времени, при этом кинетическое слагаемое может быть переписано в терминах комплексной функции  $f$  следующим образом:

$$\mathcal{T}[f] = \frac{i}{2} \frac{\bar{f} \partial_t f - f \partial_t \bar{f}}{1 + f\bar{f}}. \quad (4)$$

Мы исследуем динамику локальной намагниченности в терминах малых флуктуаций стереографического образа,  $f(\mathbf{r}, t)$ , относительно статической конфигурации,  $f_0(\mathbf{r})$ , отвечающей минимуму полной энергии,  $\int d\mathbf{r} \mathcal{E}$ . Запишем

$$f(\mathbf{r}, t) = f_0(\mathbf{r}) + \alpha(1 + f_0(\mathbf{r})\bar{f}_0(\mathbf{r}))\psi(\mathbf{r}, t), \quad (5)$$

где  $\psi$  – зависящая от времени функция, а  $\alpha$  – малый параметр нашей теории, величина и смысл которого прояснятся ниже. Рассмотрим следующее разложение  $\mathcal{L} = \mathcal{L}_0 + \alpha \mathcal{L}_1 + \alpha^2 \mathcal{L}_2 + \dots$

**Нормальные моды.** Для правильно подобранной функции  $f_0$ , члены первого порядка малости будут равны нулю,  $\mathcal{L}_1 = 0$ . При этом члены второго порядка малости записываются следующим образом:

$$\mathcal{L}_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \bar{\psi} & \psi \end{pmatrix} \left( -i \begin{pmatrix} \partial_t & 0 \\ 0 & -\partial_t \end{pmatrix} - \hat{\mathcal{H}} \right) \begin{pmatrix} \psi \\ \bar{\psi} \end{pmatrix}, \quad (6)$$

с гамильтонианом  $\hat{\mathcal{H}}$  следующего вида:

$$\hat{\mathcal{H}} = \begin{pmatrix} (-i\nabla + \mathbf{A})^2 + U & V \\ V^* & (i\nabla + \mathbf{A})^2 + U \end{pmatrix}, \quad (7)$$

где  $\nabla = \mathbf{e}_x \partial_x + \mathbf{e}_y \partial_y$ , а потенциалы  $U, V$  и  $\mathbf{A} = \mathbf{e}_x A_x + \mathbf{e}_y A_y$  есть функции  $f_0(\mathbf{r})$  и ее градиентов, см. [29].

Уравнения Эйлера–Лагранжа в случае (6) имеют следующий вид:

$$-i \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \psi \\ \bar{\psi} \end{pmatrix} = \sigma_3 \hat{\mathcal{H}} \begin{pmatrix} \psi \\ \bar{\psi} \end{pmatrix}, \quad (8)$$

а энергии нормальных мод,  $\epsilon_n$ , могут быть найдены из следующего уравнения:

$$(\epsilon_n \sigma_3 - \hat{\mathcal{H}}) \begin{pmatrix} u_n \\ v_n \end{pmatrix} = 0, \quad (9)$$

где  $\sigma_3$  – третья матрица Паули. Решения уравнения (9) подробно обсуждались в работе [29]. Они образуют полный ортонормированный базис, с нормировочным условием  $\int d^2\mathbf{r} (|u_n|^2 - |v_n|^2) = 1$ , что позволяет любую функцию  $\psi$  (вместе с сопряженной,  $\bar{\psi}$ ) разложить в ряд следующим образом:

$$\begin{pmatrix} \psi \\ \bar{\psi} \end{pmatrix} = \sum_n \begin{pmatrix} u_n & v_n^* \\ v_n & u_n^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_n \\ c_n^\dagger \end{pmatrix}, \quad (10)$$

здесь  $c_n$  и  $c_n^\dagger$  – комплексно сопряженные друг другу числа, которые после процедуры вторичного квантования становятся операторами рождения и уничтожения бозонов. При этом гамильтониан принимает стандартную форму,  $\sum_n \epsilon_n (c_n^\dagger c_n + 1/2)$ .

**Разложение намагниченности.** Разложение для локальной намагниченности по  $\alpha$  имеет следующий вид:

$$S_i = S_i^{(0)} + \alpha S(\bar{F}_i \psi + F_i \bar{\psi}) + O(\alpha^2), \quad (11)$$

где  $S_i^{(0)} = S n_i$  определяется (2) с  $f = f_0$ , а

$$\mathbf{F} = \frac{1}{1 + f_0 \bar{f}_0} \begin{pmatrix} 1 - f_0^2 \\ i(1 + f_0^2) \\ -2f_0 \end{pmatrix} \quad (12)$$

есть зависящий от  $\mathbf{r}$  вектор со следующим свойством: тройка векторов  $\text{Re } \mathbf{F}$ ,  $\text{Im } \mathbf{F}$ , и  $\mathbf{n}$  образуют ортонормированный базис.

Подставляя выражение (10) в (11), выписываем младший порядок по  $\alpha$ :

$$S_i = S_i^{(0)} + \alpha S \sum_n ((\bar{F}_i u_n + F_i v_n) c_n + \text{H.c.}). \quad (13)$$

Пользуясь стандартным коммутационным выражением,  $[c_n, c_m^\dagger] = \delta_{nm}$ , а также полнотой базиса  $(u_n, v_n)$ , можно убедиться, что при выборе значения  $\alpha = 1/\sqrt{2S}$ , автоматически выполняется коммутационное соотношение:

$$[S_j(\mathbf{r}), S_k(\mathbf{r}')] = i\epsilon_{jkl} S_l^{(0)}(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (14)$$

характерное для линейной теории спиновых волн.

**Восприимчивость.** Мы хотим вычислить тензор динамической магнитной восприимчивости,  $\chi_{ij}(\mathbf{k}, \omega) = \int dt e^{i\omega t} \chi_{ij}(\mathbf{k}, t)$ , являющийся Фурье

образом от спиновой запаздывающей функции Грина:

$$\chi_{ij}(\mathbf{k}, t) = -i\theta(t) \langle [S_i(\mathbf{k}, t), S_j(-\mathbf{k}, 0)] \rangle. \quad (15)$$

Пользуясь выражениями выше, получаем:

$$S_i(\mathbf{k}, t) = S_i^{(0)}(\mathbf{k}) + \sqrt{\frac{S}{2}} \sum_n (A_n^i(\mathbf{k}) e^{-i\epsilon_n t} c_n + \text{H.c.}). \quad (16)$$

Амплитуда спиновой волны с энергией  $\epsilon_n$  и волновым вектором  $\mathbf{k}$  дается следующим выражением:

$$A_n^j(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} (\bar{F}_j u_n + F_j v_n). \quad (17)$$

В итоге мы получаем общее выражение:

$$\chi_{ij}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{S}{2} \sum_n \left( \frac{\bar{A}_n^i(\mathbf{k}) A_n^j(-\mathbf{k})}{\omega + \epsilon_n + i\delta} - \frac{A_n^i(\mathbf{k}) \bar{A}_n^j(-\mathbf{k})}{\omega - \epsilon_n + i\delta} \right). \quad (18)$$

Следует отметить, что индекс  $n$  моды  $\epsilon_n$  содержит в себе информацию как о волновом вектор  $\mathbf{k}$ , так и о номере зоны, см. [29]. Обсудим ниже случай однородной восприимчивости, когда  $\mathbf{k} = 0$ , особенно важный для экспериментов по магнитному резонансу. Общие выражения для этого случая упрощаются.

Для случая однородной восприимчивости положим  $\mathbf{k} = 0$  и обозначим  $A_n^j(0) \equiv A_{j,n}$ . Из общих соотношений мы ожидаем, что тензор  $\chi_{ij}$  имеет симметричную и антисимметричную части, а единственным выделенным направлением в нашей задаче, ур. (1), является нормаль к плоскости,  $\hat{h} = (0, 0, 1)$ . Таким образом можно записать:

$$\begin{aligned} \chi_{ij}(\omega) &= \chi_{\parallel} \hat{h}_i \hat{h}_j + \chi_{\perp} (\delta_{ij} - \hat{h}_i \hat{h}_j) + \chi_{as} \epsilon_{ijk} \hat{h}_k, \\ \chi_{\parallel} &= \sum_n \frac{\epsilon_n S |A_{3,n}|^2}{-(\omega + i\delta)^2 + \epsilon_n^2}, \\ \chi_{\perp} &= \sum_n \frac{\epsilon_n S |A_{1,n}|^2}{-(\omega + i\delta)^2 + \epsilon_n^2}, \\ \chi_{as} &= \sum_n \frac{i\omega S \text{Im}(A_{1,n} \bar{A}_{2,n})}{-(\omega + i\delta)^2 + \epsilon_n^2}. \end{aligned} \quad (19)$$

**Восприимчивость СкК.** Введем анзац для СкК, который мы подробно обсуждали до этого в работах [27–29]. Мы показали, что стереографический образ СкК с хорошей точностью описывается суммой стереографических образов отдельных скирмионов:

$$f_{skX}(a, z_0) = \sum_{n,m} f_1(\mathbf{r} - n\mathbf{a}_1 - m\mathbf{a}_2), \quad (20)$$

где  $\mathbf{a}_1 = (0, a)$ ,  $\mathbf{a}_2 = (-\sqrt{3}a/2, a/2)$ , и  $a$  – параметр решетки СкК. Стереографический образ  $f_1$  отдельного

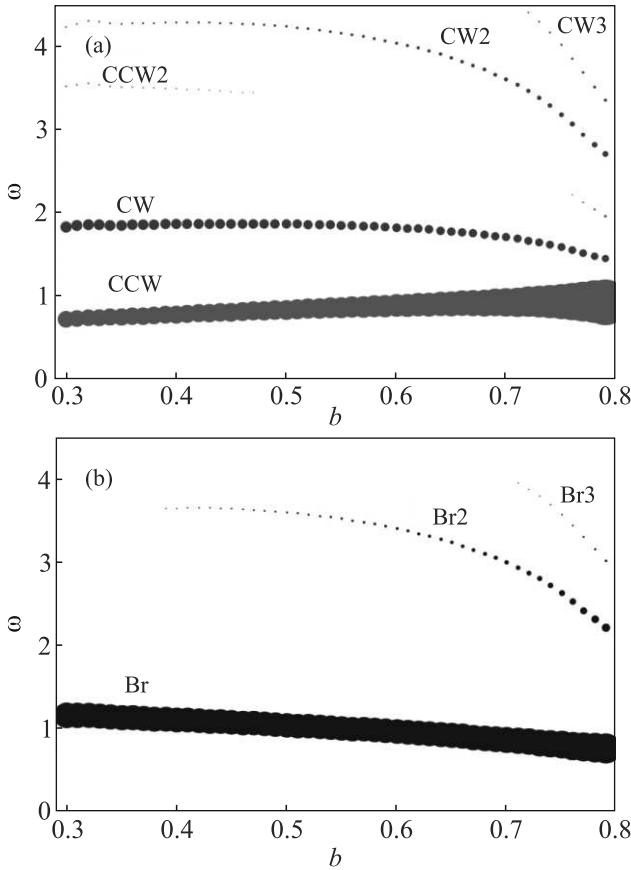


Рис. 1. (Цветной онлайн) Зависимость мнимой части (а) поперечной,  $\chi_{\perp}$ , и б) продольной,  $\chi_{\parallel}$ , компонент восприимчивости (19) от магнитного поля  $b$ . Площадь каждого кружка, пропорциональна весу,  $|A_{j,n}|^2$ , каждой дельта-функции. Можно увидеть три хорошо известных низколежащих резонанса: дыхательная мода (Br), вращение по часовой стрелке (CW) и против часовой стрелки (CCW), при этом вместе с ними видны резонансы меньшей интенсивности на больших частотах

скирмиона имеет простой полюс в центре скирмиона, а также убывает на бесконечности, поэтому мы выбираем для него следующий вид:

$$f_1 = \frac{i z_0 \kappa (z\bar{z}/z_0^2)}{\bar{z}}, \quad (21)$$

где  $z_0$  – вещественная величина, которая может быть ассоциирована с размером скирмиона, а  $\kappa$  – функция профиля скирмиона, которая была численно найдена в работе [27]. Отметим, что хорошим приближением для  $\kappa$  является функция Гаусса с шириной, зависящей от величины  $b$ . Когда величины  $B$  и  $D$  равны нулю, наш анзац (20) переходит в точное решение модели для многоскирмионной конфигурации при  $\kappa \equiv 1$ , см. [30]. Для СкК при отличных от нуля параметров  $B$  и  $D$  оптимальные значения параметров  $a$  и

$z_0$  могут быть получены из процедуры минимизации плотности энергии (1), см. [27, 28].

Пользуясь анзацем (20) для статической конфигурации СкК  $f_0$ , мы рассчитали волновые функции при  $\mathbf{k} = 0$  в уравнении (9), для тридцати шести низкоэнергетических возбуждений с  $\epsilon_n > 0$ . Формулы (12) и (17) выше использовались для вычисления компонент восприимчивости, ур. (19).

Резюмируем результаты проведенных вычислений ниже.

*i.* Из-за правил отбора, возникающих при вычислении матричных элементов  $A_{j,n}$ , не все нормальные моды проявляют себя в восприимчивости (19). Главное значение в этих правилах отбора имеет симметрия волновой функции магнонов в центре скирмиона,  $\psi \sim z^m$ . Моды с магнитным квантовым числом  $m = 0, 2$  проявляются в  $\chi_{\perp}$ , а моды с  $m = 1$  проявляются в  $\chi_{\parallel}$ , соответственно. Низкоэнергетические моды с  $m = 0, 1, 2$  называются “вращением против часовой стрелки” (CCW), “дыхательной” (Br) и “вращением по часовой стрелке” (CW), соответственно, благодаря их динамическим свойствам, см. [15, 29].

*ii.* Для CCW и CW мод антисимметричная часть восприимчивости,  $\chi_{as}$ , равна по модулю диагональной части  $\chi_{\perp}$ , с вычетами  $\text{Im}(A_{1,n}\bar{A}_{2,n}) = -|A_{1,n}|^2$  и  $\text{Im}(A_{1,n}\bar{A}_{2,n}) = |A_{1,n}|^2$ , соответственно.

*iii.* В отличие от предыдущих исследований, мы наблюдаем несколько мод с большими энергиями для каждого  $m$ , которые могут наблюдаться экспериментально. Закономерно, что для больших  $\epsilon_n$  вес таких резонансов уменьшается, это связано с уменьшением величины  $|A_{j,n}|^2$ , ур. (19). Мы показываем положение и вес соответствующих резонансов на рис. 1.

*iv.* На рисунке 1 видно, что наиболее интенсивные линии относятся в низким частотам, при этом наблюдается тенденция увеличения характерной частоты с ростом величины магнитного поля,  $b$ . Обозначение CW (CCW) на рис. 1 соответствует знаку  $\chi_{as}$ , как объяснялось выше.

*v.* Интенсивность линий,  $|A_{j,n}|^2$ , из ур. (19), изображена отдельно на рис. 2 как функция внешнего поля. Видно, что при больших значениях поля,  $b \simeq 0.75$ , близко к точке плавления СкК, интенсивность вторых резонансов CW2 и Br2 становится сопоставимой по величине с интенсивностью главного CW резонанса. Было бы интересно проверить это предсказание экспериментально.

Подводя итоги нашей работы, мы разработали теорию динамической магнитной восприимчивости СкК в подходе стереографической проекции. Полученные выражения имеют общий характер и не подразумевают конкретного типа упорядочения скирми-

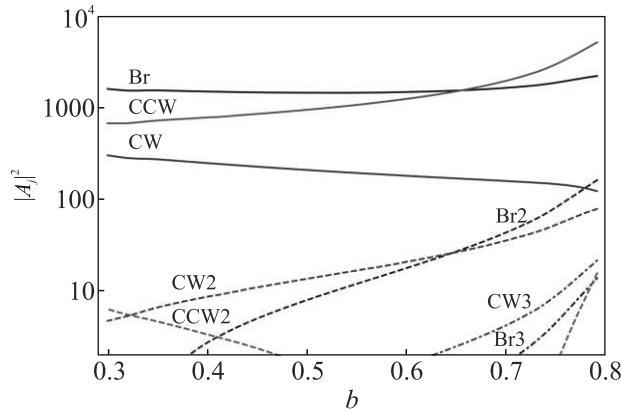


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость спектрального веса восьми резонансов изображенных на рис. 1, от величины магнитного поля  $b$

онов. Применяя полученный формализм к конфигурации треугольной решетки блоховских скирмионов, мы предсказали наличие нескольких резонансов, только три из которых до этого обсуждались в литературе.

Работа поддержана Российским научным фондом, грант # 22-22-20034, и Санкт-Петербургским научным фондом, грант # 33/2022.

1. N. Bogdanov and D. A. Yablonskii, *Sov. Phys. JETP* **68**, 101 (1989).
2. H. Vakili, J.-W. Xu, W. Zhou, M. N. Sakib, M. G. Morshed, T. Hartnett, Y. Quessab, K. Litzius, C. T. Ma, S. Ganguly, M. R. Stan, P. V. Balachandran, G. S. D. Beach, S. J. Poon, A. D. Kent, and A. W. Ghosh, *J. Appl. Phys.* **130**, 070908 (2021).
3. Z. Yan, Y. Liu, Y. Guang, K. Yue, J. Feng, R. Lake, G. Yu, and X. Han, *Phys. Rev. Appl.* **15**, 064004 (2021).
4. S. Li, W. Kang, X. Zhang, T. Nie, Y. Zhou, K. L. Wang, and W. Zhao, *Mater. Horiz.* **8**, 854 (2021).
5. S. Mühlbauer, B. Binz, F. Jonietz, C. Pfleiderer, A. Rosch, A. Neubauer, R. Georgii, and P. Böni, *Science* **323**, 915 (2009).
6. X. Z. Yu, N. Kanazawa, Y. Onose, K. Kimoto, W. Z. Zhang, S. Ishiwata, Y. Matsui, and Y. Tokura, *Nature Mater.* **10**, 106 (2010).
7. X. Z. Yu, Y. Onose, N. Kanazawa, J. H. Park, J. H. Han, Y. Matsui, N. Nagaosa, and Y. Tokura, *Nature* **465**, 901 (2010).

8. A. Tonomura, X. Yu, K. Yanagisawa, T. Matsuda, Y. Onose, N. Kanazawa, H. S. Park, and Y. Tokura, *Nano Lett.* **12**, 1673 (2012).
9. P. Huang, T. Schönenberger, M. Cantoni, L. Heinen, A. Magrez, A. Rosch, F. Carbone, and H. M. Rønnow, *Nature Nanotechn.* **15**, 761 (2020).
10. M. Garst, J. Waizner, and D. Grundler, *Journal of Physics D: Applied Physics* **50**, 293002 (2017).
11. A. A. Thiele, *Phys. Rev. Lett.* **30**, 230 (1973).
12. C. Schütte and M. Garst, *Phys. Rev. B* **90**, 094423 (2014).
13. S.-Z. Lin, C. D. Batista, and A. Saxena, *Phys. Rev. B* **89**, 024415 (2014).
14. O. Petrova and O. Tchernyshyov, *Phys. Rev. B* **84**, 214433 (2011).
15. M. Mochizuki, *Physical. Rev. Lett.* **108**, 017601 (2012).
16. S. A. Díaz, T. Hirotsawa, J. Klinovaja, and D. Loss, *Physical Review Research* **2**, 013231 (2020)
17. T. Weber, D. M. Fobes, J. Waizner et al. (Collobartion), *Science* **375**, 1025 (2022).
18. N. Ogawa, S. Seki, and Y. Tokura, *Sci. Rep.* **5**, 1(2015).
19. Y. Onose, Y. Okamura, S. Seki, S. Ishiwata, and Y. Tokura, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 037603 (2012).
20. R. Takagi, M. Garst, J. Sahliger, C. H. Back, Y. Tokura, and S. Seki, *Phys. Rev. B* **104**, 144410 (2021).
21. A. Aqeel, J. Sahliger, T. Taniguchi, S. Mändl, D. Mettus, H. Berger, A. Bauer, M. Garst, C. Pfleiderer, and C. H. Back, *Phys. Rev. Lett.* **126**, 017202 (2021).
22. O. I. Utesov, *Phys. Rev. B* **103**, 064414 (2021).
23. O. I. Utesov, *Phys. Rev. B* **105**, 054435 (2022).
24. S.-Z. Lin, A. Saxena, and C. D. Batista, *Phys. Rev. B* **91**, 224407 (2015).
25. U. Güngördü, R. Nepal, O. A. Tretiakov, K. Belashchenko, and A. A. Kovalev, *Phys. Rev. B* **93**, 064428 (2016).
26. J. H. Han, J. Zang, Z. Yang, J.-H. Park, and N. Nagaosa, *Phys. Rev. B* **82**, 094429 (2010).
27. V. E. Timofeev, A. O. Sorokin, and D. N. Aristov, *JETP Lett.* **109**, 207 (2019).
28. V. E. Timofeev, A. O. Sorokin, and D. N. Aristov, *Phys. Rev. B* **103**, 094402 (2021).
29. V. E. Timofeev and D. N. Aristov, *Phys. Rev. B* **105**, 024422 (2022).
30. A. A. Belavin and A. M. Polyakov, *JETP Lett.* **22**, 245 (1975).

# Исследование спин-орбитального взаимодействия в гетеропереходах $\text{ZnO}/\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ посредством спектроскопии спинового резонанса

А. Р. Хисамеева<sup>1)</sup>, А. В. Щепетильников, А. А. Дремин, И. В. Кукушкин

Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка, Россия

Поступила в редакцию 13 марта 2023 г.

После переработки 23 марта 2023 г.

Принята к публикации 23 марта 2023 г.

Было проведено подробное исследование спин-орбитального взаимодействия в серии содержащих двумерную электронную систему гетеропереходов  $\text{ZnO}/\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$  со структурой вюрцита. Константы спин-орбитального взаимодействия определялись из анализа обусловленной спин-орбитальным взаимодействием модификации одночастичного  $g$ -фактора в режиме квантового эффекта Холла. Величина  $g$ -фактора при этом с высокой точностью измерялась посредством методики электронного спинового резонанса в широких диапазонах магнитных полей и частот электромагнитного излучения. Константы спин-орбитального взаимодействия были определены для серии образцов с различной концентрацией Mg, что позволило получить зависимость константы спин-орбитального взаимодействия от двумерной плотности электронов  $n$ . Измеренная величина константы лежала в диапазоне  $0.5 - 0.8 \text{ meV} \times \text{\AA}$  и достаточно слабо зависела от  $n$ . Аппроксимация экспериментальных данных позволила определить коэффициенты  $\alpha_0 = 0.5 \text{ мэВ} \times \text{\AA}$  и  $\gamma = 0.12 \text{ эВ} \times \text{\AA}^3$ , задающие линейный и кубический по волновому вектору вклады в спин-орбитальное взаимодействие, соответственно. Эти значения были соотнесены с результатами, полученными другими научными группами.

DOI: 10.31857/S1234567823090082, EDN: bpmosq

Взаимодействие между спиновой степенью свободы и орбитальным движением электрона играет ключевую роль в современной спиновой физике конденсированного состояния. Действительно, оно лежит в основе целого ряда нетривиальных фундаментальных явлений, таких как спиновый и аномальный [1, 2] эффекты Холла, топологические изоляторы [3], фермионы Майорана [4]. С прикладной точки зрения, взаимодействие такого типа определяет релаксацию неравновесной спиновой поляризации [5] и может быть использовано для управления спиновыми состояниями носителя заряда [6]. Таким образом, изучение спин-орбитального взаимодействия в различных материальных системах является крайне важной научной задачей, на решение которой направлено большое количество как теоретических, так и экспериментальных исследований.

В рамках настоящей работы было проведено подробное исследование спин-орбитального взаимодействия в различных гетеропереходах  $\text{ZnO}/\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ , содержащих двумерную электронную систему. Подчеркнем, что такие структуры имеют целый ряд уникальных характеристик. С прикладной точки зрения, предсказанное в работе [7] слабое спин-орбитальное взаимодействие, а также

малая природная концентрация атомов Zn, O и Mg с ненулевым ядерным спином [8] должны приводить к длинному времени спиновой когерентности в подобных структурах [9], что крайне важно в устройствах квантового спинового транспорта [6]. Кроме того, гетеропереходы  $\text{ZnO}/\text{MgZnO}$  также представляют интерес в таких направлениях как транзисторы с высокой подвижностью электронов (НЕМТ) [10, 11] и в оптоэлектронных устройствах [12, 13]. С другой стороны, рассматриваемая двумерная система характеризуется большой величиной эффективной массы двумерных электронов ( $m = 0.33m_0$ ) [14, 15], что приводит к доминированию характерной энергии Кулоновского взаимодействия по отношению к энергии Ферми. Это открывает возможность для исследования новых фундаментальных физических явлений, обусловленных сильным электрон-электронным взаимодействием [16–22], в том числе и в области физики спина.

Полупроводник ZnO в исследованных гетеропереходах имел структуру вюрцита, которая характеризуется отсутствием центра инверсии даже в объемном материале. Наличие оси симметрии высокого порядка, совпадающее с осью роста гетероструктуры, задает гамильтониан спин-орбитального взаимодействия в виде:

$$H_{SO} = \alpha(\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{k})\mathbf{n}. \quad (1)$$

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

Здесь  $\sigma$  обозначает матрицы Паули, а  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{n}$  представляют собой электронный волновой вектор и единичный вектор, направленный вдоль направления гексагональной оси, соответственно. Коэффициент  $\alpha$  является четной функцией волнового вектора и в первом приближении является константой. Величина  $\alpha$  и ее зависимость от волнового вектора были получены теоретически в работах [7, 23–25]. Экспериментально значения  $\alpha$  в ZnO/MgZnO гетеропереходах были определены по биениям осцилляций Шубникова–де Гааза в малых магнитных полях в работе [26] для разных концентраций Mg и, как следствие, электронных плотностей в системе. Отметим, что такая методика, как правило, дает завышенные значения констант  $\alpha$  [27]. Такая особенность методики может быть связана со значительным влиянием неоднородности в электронной системе, что продемонстрировано на примере InAs-квантовых ям в работе [28]. Отметим, что даже самые чистые двумерные электронные системы, выращенные на основе GaAs, характеризуются пространственной неоднородностью плотности электронов в несколько процентов [29]. С другой стороны, сильное электрон-электронное взаимодействие оказывает существенное влияние на транспортные свойства подобных структур в области малых магнитных полей [30, 31]. Например, оно приводит к перенормировке зонных параметров и, как следствие, к значительному уменьшению энергии Ферми в таких структурах [16]. При этом, биения осцилляций Шубникова–де Гааза, обусловленные спин-орбитальным взаимодействием, должны, вероятно, стать существенно более выраженными. В работе [32] величина  $\alpha$  извлекалась из анализа одночастичного спинового расщепления, измеренного методикой электронного спинового резонанса в области магнитных полей до 1.5 Тл. При этом исследование проводилось на единственной гетероструктуре с фиксированной электронной концентрацией. Отметим, что получившееся значение оказалось в несколько раз меньше, чем полученное при исследовании биений осцилляций Шубникова–де Гааза. Анализ эффекта слабой антилокализации позволил получить параметр  $\alpha$  для трехмерной легированной Al пленки ZnO с очень высокой электронной плотностью [33]. Таким образом, несмотря на такие многообещающие свойства и повышенный интерес к ZnO/Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O гетероструктурам, систематическое исследование спин-орбитального взаимодействия в подобных системах до сих пор не было проведено, а значения получающихся на эксперименте констант спин-орбитального взаимодействия в различных работах [26, 32, 33] раз-

личаются почти на порядок. Это обстоятельство подчеркивает принципиальную важность исследований, представленных в настоящей работе.

Исследования проводились на гетероструктурах ZnO/MgZnO, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии. Высококачественная двумерная система (ДЭС) в таких структурах формируется из-за скачка в спонтанной поляризации  $\Delta P$  на границе раздела между ZnO и Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O, который приводит к наклону энергетических зон [34–36]. Величина скачка спонтанной поляризации  $\Delta P$  и, следовательно, концентрации электронов  $n$  в ДЭС, зависит от доли магния  $x$  в структуре Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O [37]. При этом плотность электронов в двумерном канале варьировалась в широком диапазоне от  $1.5 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$  до  $10.2 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ , а типичные низкотемпературные подвижности  $\mu$  были порядка  $10^5 \text{ см}^2/\text{Вс}$ . На образцах методом стандартной фотолитографии формировался диск Корбино. Контакт к двумерной электронной системе создавался посредством термического напыления слоев золота Au и титана Ti. Держатель с образцом помещался в полутораградусную камеру криостата, что позволяло проводить измерения при температуре  $T = 1.5 \text{ К}$ . Эксперименты проводились в магнитном поле до 10 Тл, ориентированном перпендикулярно плоскости двумерной электронной системы.

В качестве основного экспериментального подхода был выбран метод детектирования электронного спинового резонанса по сопротивлению двумерной электронной системы [38], который для систем с малым количеством спинов имеет огромное преимущество в чувствительности в сравнении с обычными методами исследования. Дело в том, что транспортные свойства двумерного канала крайне чувствительны к поглощению электромагнитного излучения в режиме квантового эффекта Холла. При этом спиновый резонанс проявляет себя как пик в сопротивлении образца. Более подробно об экспериментальной технике можно прочесть в наших предыдущих работах [39, 40]. Отметим здесь основные моменты. Для улучшения соотношения сигнал/шум вместо прямого измерения контактанса в геометрии Корбино использовалась стандартная техника двойного синхронного детектирования. По образцу пропускался переменный ток  $I = 0.1 \text{ мкА}$  с частотой модуляции 1.5 кГц, первый синхронный детектор измерял сигнал, обратно пропорциональный контактансу  $1/\sigma_{xx}$  образца, а второй был настроен на частоту амплитудной модуляции микроволнового излучения  $f_{\text{mod}} \sim 30 \text{ Гц}$  и измерял изменение величины  $1/\sigma_{xx}$ . Микроволновое излучение  $F = 15\text{--}140 \text{ ГГц}$

передавалось к образцу через сверхразмерный волновод. Источником излучения выступал генератор КУ-диапазона и сопряженные с ним блоки умножения частоты с выходной мощностью в диапазоне 1–4 мВт. В ходе измерений фиксировалась частота падающего микроволнового излучения  $F$ , падающего на образец, и с разворотом магнитного поля  $B$  спиновый резонанс наблюдался как пик в изменении  $\sigma_{xx}$ . Магнитное поле при проведении спектроскопии спинового резонанса достигало 5 Тл. На вставке к рис. 1 изображена схема измерения кондуктанса диска Корбино.

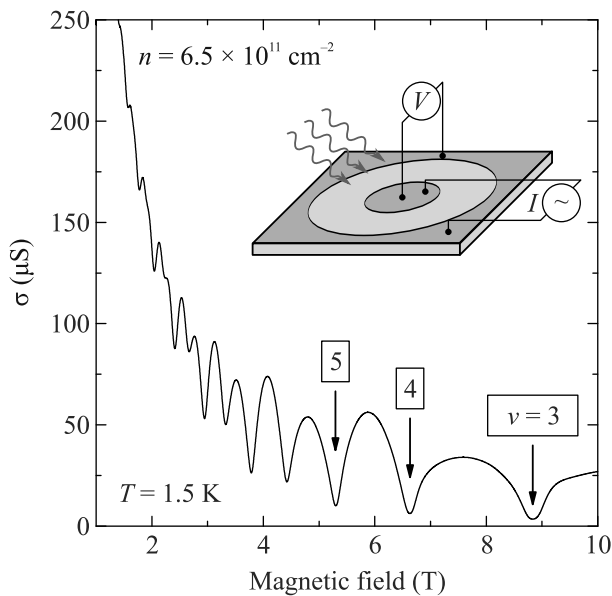


Рис. 1. (Цветной онлайн) Зависимость проводимости диска Корбино  $\sigma$  от магнитного поля  $B$  для гетероструктуры ZnO/MgZnO с плотностью двумерных электронов  $n = 6.5 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$  и подвижностью  $\mu = 160 \times 10^3 \text{ см}^2/\text{Вс}$ , полученная при температуре  $T = 1.5 \text{ К}$ . Отмечены несколько первых факторов заполнения  $\nu$ . На вставке к рисунку изображена экспериментальная схема измерения кондуктанса образца, изготовленного в виде диска Корбино.

Типичная зависимость магнитопроводимости  $\sigma_{xx}$  диска Корбино показана на рис. 1 для образца с плотностью двумерных электронов  $n = 6.5 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$  и подвижностью  $\mu = 160 \times 10^3 \text{ см}^2/\text{Вс}$ , полученная при температуре  $T = 1.5 \text{ К}$ . На графике рис. 1 наблюдаются хорошо различимые осцилляции Шубникова-де Гааза, а также отмечены несколько факторов заполнения  $\nu$ . Отметим, что биения осцилляций Шубникова-де Гааза в рамках наших экспериментов не наблюдались. Вероятно, это связано с существенно более высокой температурой в сравнении с работой [26].

Методика определения константы спин-орбитального взаимодействия по модификации одночастичного спинового расщепления в режиме квантового эффекта Холла основывается на том, что в случае квантующих магнитных полей, спин-орбитальное взаимодействие перемешивает уровни Ландау с разными номерами и проекциями спина. При этом происходит модификация  $g$ -фактора электрона. В присутствии спин-орбитального взаимодействия типа Рашбы  $\hat{H}_{\text{SO}} = \alpha(\hat{\sigma}_x k_y - \hat{\sigma}_y k_x)$  поправка к фактору Ландау может быть вычислена во втором порядке теории возмущений, и непосредственно в нечетном факторе заполнения  $\nu = 2N + 1$  дается следующим образом:

$$g^* - g_0^* = \frac{4\alpha^2 m_0^2 \nu^2}{\pi \hbar^4 n (2m_0/m^* - g_0^*)} \sim \alpha^2 \nu^2. \quad (2)$$

Таким образом, поправка к  $g$ -фактору линейно зависит от квадрата фактора заполнения, а из наклона зависимости можно извлечь  $\alpha$ . На эксперименте эффективный  $g^*$ -фактор электрона извлекается с очень высокой точностью из положения спинового резонанса по магнитному полю  $B$  при фиксированной частоте микроволнового излучения  $F$  как  $g = hF/\mu_B B$ , где  $h$  – постоянная Планка, а  $\mu_B$  – магнетон Бора. На вставке к рис. 2 продемонстрирована типичная линия спинового резонанса вблизи фактора заполнения  $\nu = 7$  при частоте микроволнового излучения  $F = 103 \text{ ГГц}$  для гетероструктуры ZnO/MgZnO с плотностью двумерных электронов  $n = 6.5 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$  и подвижностью  $\mu = 160 \times 10^3 \text{ см}^2/\text{Вс}$ , полученная при температуре  $T = 1.5 \text{ К}$ .

На рисунке 2 показаны экспериментальные зависимости  $g$ -фактора от величины  $\nu^2$  для всех образцов. При этом символы обозначают экспериментальные данные, а сплошная линия представляет собой линейную аппроксимацию. Вблизи каждого набора точек указана электронная плотность  $n$ . Подчеркнем, что аппроксимации осуществлялись с использованием единственного подгоночного параметра – константы спин-орбитального взаимодействия  $\alpha$  для соответствующей  $n$  – и при этом хорошо согласуются с полученными экспериментальными данными. Определенные таким образом значения константы спин-орбитального взаимодействия лежат в диапазоне от 0.5 до 0.8 мэВ · Å и демонстрируют относительно слабую зависимость от электронной плотности и концентрации Mg в барьерных слоях, представленную на рис. 3а.

Эта зависимость может быть объяснена при учете зависимости величины  $\alpha$  от волнового вектора. При этом в полном гамильтониане спин-орбитально-



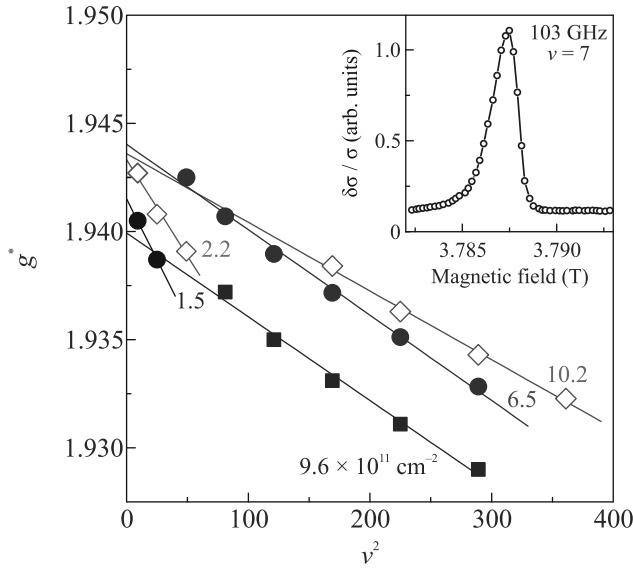


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость электронного  $g^*$ -фактора от величины  $\nu^2$  для всех исследуемых структур, с указанием соответствующих значений плотности двумерных электронов. Вставка: типичная линия спинового резонанса вблизи фактора заполнения  $\nu = 7$  при частоте микроволнового излучения  $F = 103$  ГГц для гетероструктуры ZnO/MgZnO с плотностью двумерных электронов  $n = 6.5 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$  и подвижностью  $\mu = 160 \times 10^3 \text{ см}^2/\text{Вс}$ . Температура эксперимента  $T = 1.5$  К

го взаимодействия возникают кубические по волновому вектору слагаемые, имеющие вид [24]:

$$H_{\text{DSO}} = \gamma(bk_z^2 - k_{\parallel}^2)(\hat{\sigma}_x k_y - \hat{\sigma}_y k_x), \quad (3)$$

где  $\gamma$  представляет собой константу взаимодействия Дрессельхауза, и параметр  $b$  равен величине 3.85 для вюрцитных материалов. В ведущем порядке по  $\gamma$ , учет такого взаимодействия приводит к следующей модификации эффективной константы спин-орбитального взаимодействия:

$$\alpha - \alpha_0 = \gamma \left( b \langle \hat{k}_z^2 \rangle - 2\pi n \right). \quad (4)$$

Здесь коэффициенты  $\alpha_0$  и  $\gamma$ , фактически, задают линейный и кубический по волновому вектору вклады в спин-орбитальное взаимодействие, соответственно. При изучаемых в настоящей работе концентрациях был заполнен только нижний уровень поперечного квантования, по волновой функции которого и вычислялось среднее значение  $\langle \hat{k}_z^2 \rangle$ .

Волновая функция поперечного квантования вычислялась в приближении Хартри путем численного решения уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Psi''(z) + [U_0 \theta(-z) - e\Phi(z)] \Psi(z) = E \Psi(z), \quad (5)$$

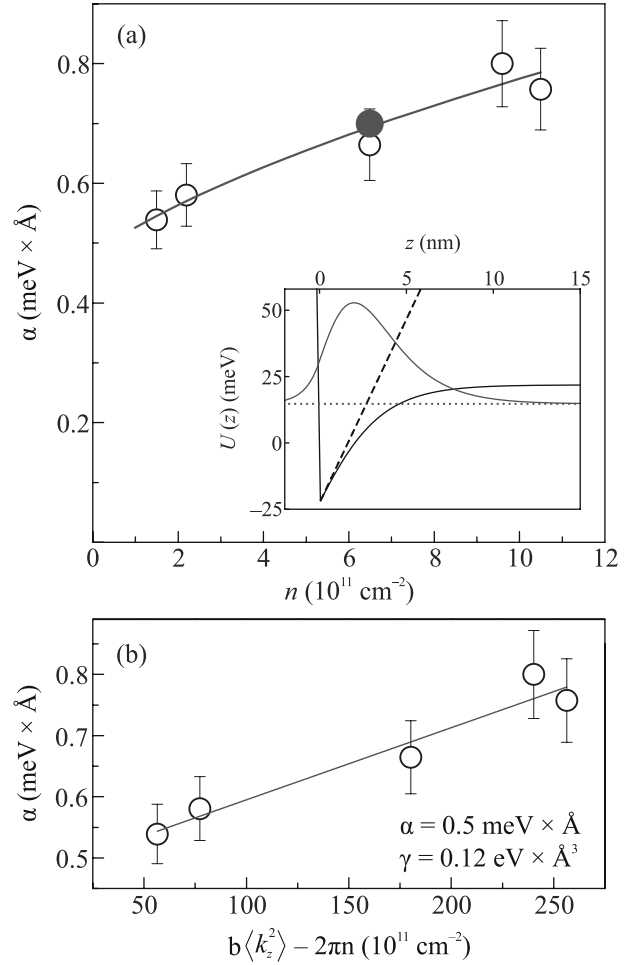


Рис. 3. (Цветной онлайн) Экспериментально полученные значения коэффициента Рашбы  $\alpha$ . (a) – Зависимость  $\alpha$  от двумерной плотности электронов. Синие пустые круги – экспериментальные данные, полученные в рамках настоящей работы. Красный заполненный круг – значение, полученное в работе [32]. Сплошной линией показана теоретическая подгонка  $\alpha$  согласно формуле (4). Вставка: красная и красная пунктирная линии – квадрат волновой функции и энергия нижайшего уровня размерного квантования, соответственно. Черная и черная штриховая линии – профиль потенциальной ямы с учетом и без учета самосогласования. Данные приведены для гетероструктуры ZnO/MgZnO с плотностью двумерных электронов  $n = 6.5 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ . (b) – Зависимость  $\alpha$  от параметра  $(b \langle \hat{k}_z^2 \rangle - 2\pi n)$ . Сплошной линией показана линейная аппроксимация зависимости согласно формуле (4). Из наклона прямой и ее пересечения с осью ординат определены константы  $\alpha_0$  и  $\gamma$ , указанные на рисунке

где потенциальный скачок  $U_0$  связан с зависимостью скачка зоны проводимости от концентрации Mg, а электростатический потенциал самосогласо-

ванном образом определяется из решения уравнения Пуассона:

$$-\Phi''(z) = \frac{4\pi en}{\epsilon} (\delta(z) - |\Psi(z)|^2). \quad (6)$$

Первый член в правой части уравнения описывает заряды, возникающие на гетеропереходе за счет скачка поляризации с последующей зарядовой компенсацией [37], и такой его вид связан с электронейтральностью перехода. Величина диэлектрической проницаемости составляла  $\epsilon \approx 8.5$ . Результат самосогласованного вычисления для концентрации  $n = 6.5 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$  изображен на вставке к рис. 3а.

Отметим, что из размерных соображений соотношение между двумя вкладками в (4) может быть оценено как:

$$\frac{b \langle \hat{k}_z^2 \rangle}{2\pi n} \simeq bc r_s^{2/3} \quad (7)$$

где безразмерная константа  $c$  определяется конкретным видом профиля волновой функции, а параметр Вигнера–Зейца дается формулой  $r_s = \hbar^2 \epsilon / m^* e^2 \sqrt{\pi n}$ . В интересующих нас диапазоне параметров, эта константа слабо зависела от концентрации и лежала в диапазоне от 5 до 6, а значения  $r_s$  оказывались достаточно большими. Как следствие, при столь низких концентрациях, основной вклад в поправку эффективной константы спин-орбитального взаимодействия (4) определяется именно первым членом.

Используя результаты самосогласованного расчета формы квантовой ямы, можно построить зависимость константы спин-орбитального взаимодействия от параметра  $b \langle \hat{k}_z^2 \rangle - 2\pi n$ . Построенные таким образом экспериментальные данные продемонстрированы на рис. 3б. Хорошо видно, что получившаяся зависимость неплохо ложится на прямую. При этом по наклону линии можно вычислить коэффициент  $\gamma \approx 0.12 \pm 0.04 \text{ эВ} \times \text{Å}^3$ , а по пересечению прямой с осью ординат можно извлечь значение  $\alpha_0 \approx 0.5 \pm 0.05 \text{ мэВ} \times \text{Å}$ .

Сравним полученные экспериментально значения с результатами других научных групп. На рисунке 3а показана зависимость  $\alpha$  от двумерной плотности электронов. Синие пустые круги представляют собой экспериментальные данные, измеренные в рамках настоящей работы, а красная линия – аппроксимация согласно формуле (4). Величина  $\alpha$ , полученная в работе [32] по зависимости одночастичного спинового расщепления от магнитного поля в области малых полей, обозначена красным заполненным кругом. Эта точка хорошо согласуется с нашими экспериментальными результатами. Рассмотрим теперь работу [33]. В ней величина  $\alpha = 4.4 \text{ мэВ} \times \text{Å}$

была получена из анализа эффекта слабой антилокализации для трехмерной легированной пленки ZnO. На первый взгляд, это значение не сходится с полученными нами результатами, так как превосходит их практически на порядок. Однако, если, используя параметры  $\gamma \approx 0.12 \text{ эВ} \times \text{Å}^3$  и  $\alpha_0 \approx 0.5 \text{ мэВ} \times \text{Å}$ , рассчитать константу спин-орбитального взаимодействия для такой структуры с учетом трехмерной концентрации электронов в слое ZnO  $n = 1.8 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$ , получившееся значение  $\alpha$  будет равно  $4.2 \text{ мэВ} \times \text{Å}$ , что хорошо согласуется с приведенной выше величиной в  $4.4 \text{ мэВ} \times \text{Å}$ . Отметим, что гораздо худшее согласие наблюдается при сравнении наших данных с результатами [26] анализа биений осцилляций Шубникова–Гааза в малых магнитных полях. Хотя величины  $\alpha_0$  хорошо согласуется ( $0.5 \text{ мэВ} \times \text{Å}$  в [26]), величина  $\gamma$ , полученная нами оказывается сильно меньшей значения  $\gamma \approx 0.62 \text{ эВ} \times \text{Å}^3$ , приведенного в указанной выше работе. Вероятно, указанная расходимость является проявлением сильного электрон-электронного взаимодействия [30, 31] свойственного двумерным электронным системам на базе ZnO.

В заключение, было проведено подробное исследование спин-орбитального взаимодействия в двумерной электронной системе на основе высококачественных гетеропереходов ZnO/Mg<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O посредством методики электронного спинового резонанса. По модификации величины одночастичного  $g$ -фактора, обусловленной спин-орбитальным взаимодействием в режиме квантового Холла, были установлены константы спин-орбитального взаимодействия  $\alpha$  для серии образцов с различной концентрацией Mg и, как следствие, двумерной электронной плотностью. Экспериментальные данные продемонстрировали, что величина константы спин-орбитального взаимодействия лежит в диапазоне  $0.5\text{--}0.8 \text{ мэВ} \times \text{Å}$ . Аппроксимация полученных результатов позволила определить коэффициенты  $\alpha_0 = 0.5 \text{ мэВ} \times \text{Å}$  и  $\gamma = 0.12 \text{ эВ} \times \text{Å}^3$ , задающие линейный и кубический по волновому вектору вклады в спин-орбитальное взаимодействие, соответственно.

Работа была выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант # 20-72-10097).

Авторы благодарны Дж. Фалсон (J. Falson) за предоставленные для исследования гетероструктуры.

1. M. Konig, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L.W. Molenkamp, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, *Science* **318**, 766 (2007).
2. J. Sinova, S. O. Valenzuela, J. Wunderlich, C. H. Back, and T. Jungwirth, *Rev. Mod. Phys.* **87**, 1213 (2015).

3. M. Z. Hasan, and C. L. Kane, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045 (2010).
4. S. Nadj-Perge, I. K. Drozdov, J. Li, H. Chen, S. Jeon, J. Seo, A. H. MacDonald, B. A. Bernevig, and A. Yazdani, *Science* **346**, 602 (2014).
5. М. И. Дьяконов, В. И. Перель, *ФТТ* **13**(12), 3581 (1971).
6. S. Datta and B. Das, *Appl. Phys. Lett.* **56** 665 (1990).
7. L. C. Lew, Y. Voon, M. Willatzen, M. Cardona, and N. E. Christensen, *Phys. Rev. B* **53**, 10703 (1996).
8. J. R. de Laeter, J. K. Böhlke, P. De Bièvre, H. Hidaka, H. S. Peiser, K. J. R. Rosman, and P. D. P. Taylor, *Pure Appl. Chem.* **75**, 683 (2003).
9. M. Fanciulli (editor), *Electron Spin Resonance and Related Phenomena in Low Dimensional Structures*, Springer, Berlin (2009).
10. U. K. Mishra, P. Parikh, and W. Yi-Feng, *Proc. IEEE* **90**, 1022 (2002).
11. K. Koike, K. Hama, I. Nakashima, G. Takada, M. Ozaki, K. Ogata, S. Sasa, M. Inoue, and M. Yano, *Jpn. J. Appl. Phys.* **43** L1372 (2004).
12. K. Ellmer, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **34**, 3097 (2001).
13. D. C. Look, *Semicond. Sci. Technol.* **20**, S55 (2005).
14. V. E. Kozlov, A. B. Van'kov, S. I. Gubarev, I. V. Kukushkin, V. V. Solovyev, J. Falson, D. Maryenko, Y. Kozuka, A. Tsukazaki, M. Kawasaki, and J. H. Smet, *Phys. Rev. B* **91**, 085304 (2015).
15. A. V. Shchepetilnikov, Yu. A. Nefyodov, A. A. Dremin, and I. V. Kukushkin, *JETP Lett.* **107**, 770 (2018).
16. V. V. Solovyev and I. V. Kukushkin, *Phys. Rev. B.* **96**, 115131 (2017).
17. A. B. Van'kov, B. D. Kaysin, and I. V. Kukushkin, *Phys. Rev. B.* **98**, 121412(R) (2018).
18. А. Б. Ваньков, Б. Д. Кайсин, И. В. Кукушкин, *Письма в ЖЭТФ* **110**(4), 268 (2019).
19. Б. Д. Кайсин, А. Б. Ваньков, И. В. Кукушкин, *Письма в ЖЭТФ* **112**(1), 62?67 (2020).
20. А. Б. Ваньков, И. В. Кукушкин, *Письма в ЖЭТФ* **113**(2), 112 (2021).
21. A. V. Shchepetilnikov, A. R. Khisameeva, and Y. A. Nefyodov, *JETP Lett.* **113**, 657 (2021).
22. J. Falson, I. Sodemann, B. Skinner, D. Tabrea, Y. Kozuka, A. Tsukazaki, M. Kawasaki, K. von Klitzing, and J. H. Smet, *Nat. Mater.* **21**, 311 (2022).
23. W. T. Wang, C. Wu, S. Tsay, M. Gau, I. Lo, H. Kao, D. Jang, and J.-C. Chiang, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 082110 (2007).
24. J. Fu and M. Wu, *J. Appl. Phys.* **104**, 093712 (2008).
25. J. Fu, P. H. Penteado, D. R. Candido, G. J. Ferreira, D. P. Pires, E. Bernardes, and J. C. Egues, *Phys. Rev. B* **101**, 134416 (2020).
26. D. Maryenko, M. Kawamura, A. Ernst, V. K. Dugaev, E. Ya. Sherman, M. Kriener, M. S. Bahramy, Y. Kozuka, and M. Kawasaki, *Nat. Commun.* **12**(1), 3180 (2021).
27. T. Schaeppers, N. Thillosen, S. Cabanas, N. Kaluza, V. A. Guzenko, and H. Hardtdegen, *Phys. Status Solidi (c)* **3**, 4247 (2006).
28. S. Brosig, K. Ensslin, R. J. Warburton, C. Nguyen, B. Brar, M. Thomas, and H. Kroemer, *Phys. Rev. B* **60**, R13989(R) (1999).
29. Y. J. Chung, K. W. Baldwin, K. W. West, N. Haug, J. van de Wetering, M. Shayegan, and L. N. Pfeiffer, *Nano Lett.* **19**, 1908 (2019).
30. G.-H. Chen and M. E. Raikh, *Phys. Rev. B* **60**, 4826 (1999).
31. A. V. Shchepetilnikov, A. R. Khisameeva, A. A. Dremin, and I. V. Kukushkin, *JETP Lett.* **115**, 548 (2022).
32. Y. Kozuka, S. Teraoka, J. Falson, A. Oiwa, A. Tsukazaki, S. Tarucha, and M. Kawasaki, *Phys. Rev. B* **87**, 205411 (2013).
33. T. Andrearczyk, J. Jaroszyński, G. Grabecki, T. Dietl, T. Fukumura, and M. Kawasaki, *Phys. Rev. B* **72**, 121309(R) (2005).
34. J. Betancourt, J. J. Saavedra-Arias, J. D. Burton, Y. Ishikawa, E. Y. Tsymlal, and J. P. Velev, *Phys. Rev. B* **88**, 085418 (2013).
35. V. V. Solovyev, A. B. Van'kov, I. V. Kukushkin, J. Falson, D. Zhang, D. Maryenko, Y. Kozuka, A. Tsukazaki, J. H. Smet, and M. Kawasaki, *Appl. Phys. Lett.* **106**, 082102 (2015).
36. J. Falson and M. Kawasaki, *Rep. Prog. Phys.* **81**, 056501 (2018).
37. Y. Kozuka, A. Tsukazaki, and M. Kawasaki, *Appl. Phys. Rev.* **1**, 011303 (2014).
38. D. Stein, K. von Klitzing, and G. Weimann, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 130 (1983).
39. A. V. Shchepetilnikov, D. D. Frolov, Y. A. Nefyodov, I. V. Kukushkin, L. Tiemann, C. Reichl, W. Dietsche, and W. Wegscheider, *JETP Lett.* **108**, 481 (2018).
40. A. V. Shchepetilnikov, D. D. Frolov, V. V. Solovyev, Y. A. Nefyodov, A. Großer, T. Mikolajick, S. Schmult, and I. V. Kukushkin, *Appl. Phys. Lett.* **113**, 052102 (2018).

# Insight to structural, electronic, optical and thermoelectric properties of NaCaSb and KCaSb half Heusler compounds: a DFT approach

*D. Behera<sup>1)</sup>, S. K. Mukherjee<sup>1)</sup>*

*Department of Physics, Birla Institute of Technology, 835215 Mesra, Ranchi, India*

Submitted 6 February 2023

Resubmitted 24 March 2023

Accepted 29 March 2023

DOI: 10.31857/S1234567823090094, EDN: bpofoe

Due to the necessity for sustainable energy sources, numerous energy conversion technologies have recently been the subject of in-depth research. The transformation of waste heat into productive energy sources have stimulated interest in thermoelectric materials. A figure of merit ( $ZT$ ) can be used to assess a material suitability for use in thermoelectric (TE) devices expressed as  $ZT = S^2\sigma T/\kappa$ , where  $S$ ,  $\sigma$ ,  $T$ , and  $\kappa$  stand for Seebeck coefficient, electrical conductivity, temperature, and thermal conductivity, respectively [1, 2].  $ZT$  must have a considerable power factor (PF) ( $S^2\sigma$ ) and minimal thermal conductivity ( $\kappa$ ) for the best performance. The analysis of these material transport properties was therefore the focus of various theoretical and experimental studies. Using the first principle computing, numerous groups have described the optoelectronic and transport properties of the non-magnetic half heuslers (HHs). Those with eight-valence electrons are expected to have semiconductor properties. Such HHs may have a wide bandgap dependent on the constituent atoms [3, 4]. Zhang et al. recently studied a number of HHs such as CuLiS, KZnS, KBeN, KBaSb, LiMgSb, KInSn including NaCaSb and KCaSb promising for energy harvesting application [5]. P. S. Kacimi et al. explored HHs of type I-II-V and I-III-IV were specifically, their structural, optoelectronic, and transport properties [6]. The outcomes mentioned above inspired us to study further HH compounds. Here, we use first principles simulations to investigate the structural, electrical, elastic, optical, and thermoelectric features of NaCaSb and KCaSb HH compounds. The findings of this study ought to be beneficial for future theoretical and experimental research on HHs. The HHs are found to crystallize in the non-centrosymmetric cubic space group 216, F-43m. To establish if the examined HHs are dynamically stable, we look at the phonon dispersion. The lack of any negative (imaginary) frequencies in the phonon disper-

sion curves indicates the dynamic stability of the investigated HHs. We estimated the band structures of NaCaSb and KCaSb in order to examine and demonstrate the applicability of the considered compounds for electrical devices. The computed band gap is observed to be indirect for NaCaSb and equals 0.55 and 1.27 eV for generalized gradient approximation (GGA) and modified Becke–Johnson (mBJ) approximation respectively. For KCaSb the computed bandgap is found to be direct and equals 0.49 and 1.23 eV for GGA and mBJ approximation respectively. The variation of the extinction coefficient,  $k(\omega)$ , in relation to photon energy is investigated. The graph indicates that oscillations are initially undetectable, but as photon energy increases, oscillations can be seen in the visible spectrum. Good absorption spectra facilitate application of the investigated NaCaSb and KCaSb in optoelectronics devices.

For the optimal thermoelectric performance, the Seebeck coefficient must be high. For  $p$ -type materials,  $S$  is positive, for  $n$ -type materials,  $S$  is negative. Figure 1a represents the variation of  $S$  with temperature suggesting  $p$ -type behavior with a positive Seebeck coefficient. The magnitude of  $\sigma/\tau$  is increasing with temperature reflecting typical semiconducting characteristics as represented in Fig. 1b. The high electrical conductivity of KCaSb is due to the high density of charge carriers. The  $\sigma/\kappa$  value is found to be in the range of  $10^{-5}$  indicating better electrical conductivity and less thermal conductivity [7]. The PF, which is a function of electrical conductivity, can be used to estimate a thermoelectric efficiency. The computed PF is shown in Fig. 11d of the main text: for NaCaSb and KCaSb, the obtained PF at 900 K is  $2.9 \times 10^{11}$  W/K<sup>2</sup>ms and  $7.1 \times 10^{11}$  W/K<sup>2</sup>ms, respectively. We conclude, the compounds can be used in thermoelectric devices because of the high-power factor at high temperatures.

This is an excerpt of the article “Insight to structural, electronic, optical and thermoelectric properties of NaCaSb and KCaSb half Heusler compounds: A DFT

<sup>1)</sup>e-mail: debidatta95@yahoo.com; sanat\_aphy@yahoo.co.in

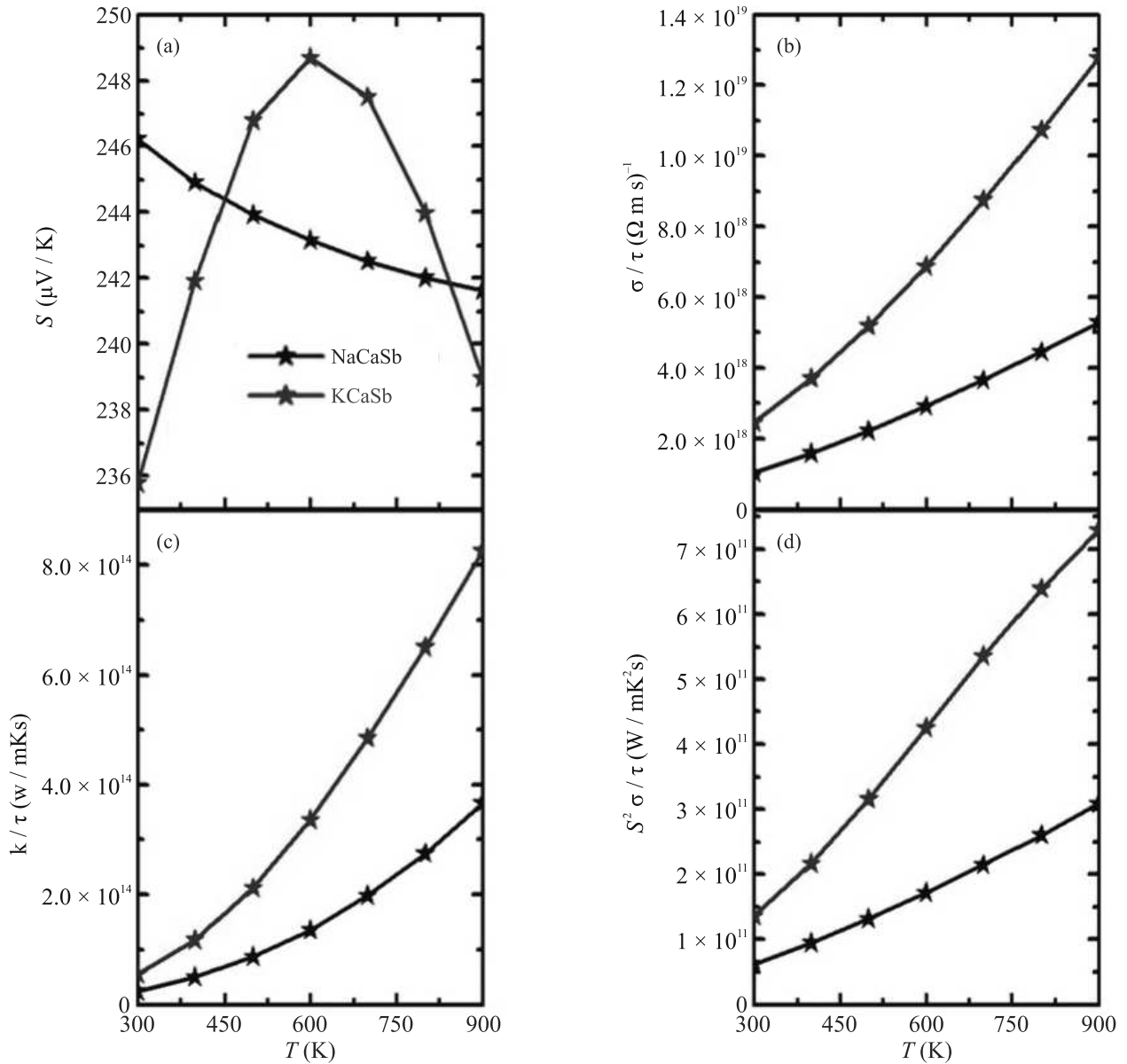


Fig. 1. (Colored online) Computed (a) – Seebeck coefficient  $S$ , (b) – electrical conductivity  $\sigma/\tau$ , (c) – thermal conductivity  $\kappa/\tau$ , and (d) – PF  $S^2\sigma/\tau$  for NaCaSb and KCaSb

approach”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364023600295

1. H. J. Goldsmid, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **22**, 280 (2021).
2. D. Behera, R. Sharma, H. Ullah, H. S. Waheed, and S. K. Mukherjee, *J. Solid State Chem.* **312**, 123259 (2022).

3. J.-W. G. Bos and R. A. Downie, *J. Phys. Condens. Matter* **26**, 433201 (2014).
4. L. Huang, Q. Zhang, B. Yuan, X. Lai, X. Yan, and Z. Ren, *Mater. Res. Bull.* **76**, 107 (2016).
5. X. Zhang, L. Yu, A. Zakutayev, and A. Zunger, *Adv. Funct. Mater.* **22**, 1425 (2012).
6. S. Kacimi, H. Mehnane, and A. Zaoui, *J. Alloys Compd.* **587**, 451 (2014).
7. M. Jonson and G. D. Mahan, *Phys. Rev. B* **21**, 4223 (1980).

# Обнаружение спектров ЭПР оптически индуцированных носителей со свойствами эффективной массы в дихалькогениде переходного металла $WS_2$

Р. А. Бабунц, А. В. Батуева<sup>1)</sup>, А. С. Гурин, К. В. Лихачев, Е. В. Единач, П. Г. Баранов

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

Поступила в редакцию 6 марта 2023 г.

После переработки 30 марта 2023 г.

Принята к публикации 30 марта 2023 г.

Спиновые свойства дихалькогенидов переходных металлов представляют интерес для применений в спинтронике. Нами были обнаружены анизотропные спектры ЭПР в монокристалле  $WS_2$ , индуцированные оптическим возбуждением. Сделано предположение, что эти спектры принадлежат локализованным носителям вблизи валентной зоны и отражают особенности  $5d$  оболочки кристалла. Показано, что  $g$ -фактор для перпендикулярной ориентации магнитного поля относительно аксиальной оси симметрии кристалла (магнитное поле ориентировано в плоскости слоя) больше, чем для параллельной ориентации магнитного поля (перпендикулярно плоскости слоя), что может дать информацию о типе  $5d$  функции. Наиболее вероятно, что мы имеем  $5d(z^2 - r^2)$  волновую функцию, которую можно будет связать с валентной зоной кристалла.

DOI: 10.31857/S1234567823090100, EDN: brqafb

Двумерные материалы (2D) обладают рядом уникальных свойств, делающих их привлекательными для использования в многочисленных устройствах микроэлектроники. Интерес к двумерным материалам был привлечен в связи с активными исследованиями двумерного графена [1]. Поскольку графен не имеет запрещенной зоны, его применение в электронике и оптике ограничено. На данный момент чрезвычайно перспективными считаются полупроводниковые соединения W, Mo с серой и селеном, так называемые дихалькогениды переходных металлов (ДПМ) в виде, например,  $MoS_2$ ,  $WS_2$  из-за их особой двумерной слоистой структуры и потенциала в качестве высокоэффективных функциональных наноматериалов. 2D-материалы характеризуются слоистой кристаллической структурой с прочными связями в плоскости, где слои связаны вместе слабыми силами Ван-дер-Ваальса (vdW) [2–6]. Наличие конечной ширины запрещенной зоны, фоточувствительность и выдающиеся электронные и оптические свойства делают их многообещающими кандидатами для оптоэлектроники и наноэлектроники.

Сильное спин-орбитальное взаимодействие за счет участия  $d$ -электронов в образовании химических связей приводит к спиновому расщеплению зон и делает ДПМ материалы перспективными для применений в спинтронике [7]. Связанные спиновые

и долинные степени свободы в ДПМ считаются многообещающей платформой для обработки информации [8].

Серия номинально чистых объемных кристаллов  $WS_2$  толщиной порядка сотен микрон была выращена методом химического осаждения из газовой фазы (*chemical vapor deposition* – CVD). Для исследования были использованы образцы со средними размерами примерно  $2 \times 2 \times 0.1$  мм<sup>3</sup>, при этом размеры и толщины образцов варьировались в разных экспериментах. Для измерений комбинационного рассеяния света (КРС) и фотолюминесценции (ФЛ) использовался конфокальный микроскоп, выполненный на базе NT-MDT SI, оборудованный спектрометром SOL Instruments и ПЗС-матрицей (CCD matrix Andor) со спектральным диапазоном 200–1100 нм и разрешением 0.7 нм для ФЛ и  $0.7$  см<sup>-1</sup> для КРС. Для сбора сигнала использовался объектив микроскопа  $\times 100$  с числовой апертурой  $NA = 0.7$ . Входное отверстие диаметром 1000 мкм обеспечивало сбор сигнала с объема  $\sim 5$  мкм<sup>3</sup>. В режиме регистрации спектров КРС и ФЛ оптическое возбуждение происходило с помощью полупроводникового лазера с длиной волны  $\lambda = 532$  нм, мощность возбуждения примерно 1 мВт (см. описание установки в [9]). ЭПР-исследования проводились на линейке высокочастотных ЭПР/ОДМР спектрометров (94 ГГц и 130 ГГц), разработанных в ФТИ им. А. Ф. Иоффе совместно с фирмой ДОК, не имеющих мировых аналогов (см. описание установки в

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

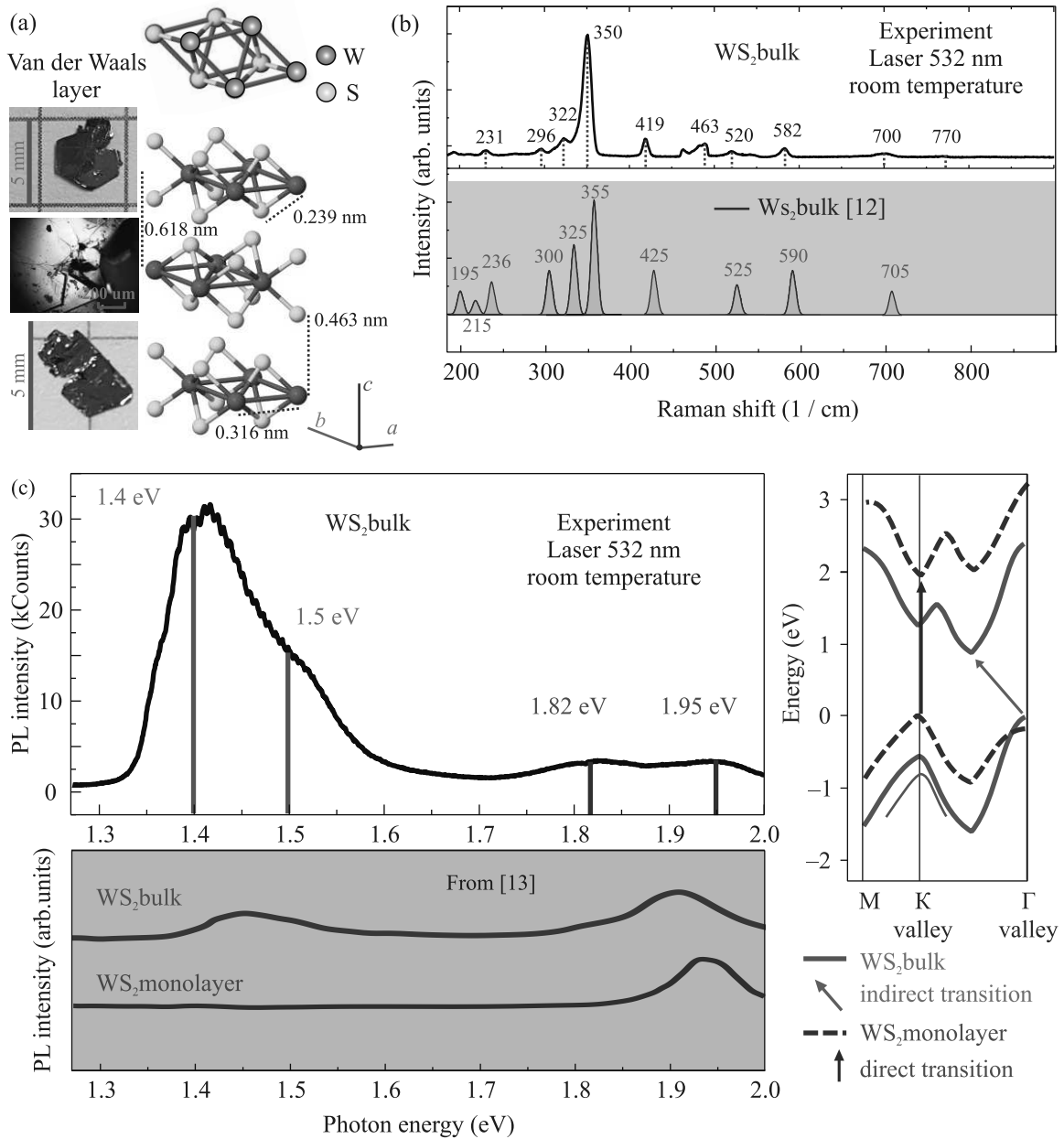


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Эскиз кристаллической структуры объемного материала 2H-WS<sub>2</sub>, на вставке приведены фотографии двух из серии исследованных образцов. (б) – Экспериментальный спектр КРС, зарегистрированный в исследуемом объемном кристалле WS<sub>2</sub> при комнатной температуре, а также литературные данные по спектрам КРС в материалах WS<sub>2</sub> [12]. (с) – Спектр ФЛ, зарегистрированный в исследуемом объемном кристалле WS<sub>2</sub> при возбуждении лазером с длиной волны 532 нм при комнатной температуре. Внизу показаны литературные данные по типичным спектрам ФЛ в объемном материале и в однослойном материале WS<sub>2</sub> [13]. Справа условно показаны фрагменты верхней части валентной зоны и нижней части зоны проводимости для объемного материала (красные линии) и однослойного материала (синие пунктирные линии)

[10, 11]). Использовалась магнитооптическая система с криостатом замкнутого типа, позволяющая изменять магнитное поле в диапазоне от  $-7$  Тл до  $+7$  Тл с плавным переходом через нулевое значение, диапазон температур 1.5–300 К.

На рисунке 1а представлен эскиз кристаллической структуры объемного материала 2H-WS<sub>2</sub>, указаны основные расстояния между атомами и межслоевое расстояние 0.618 нм, на вставке приведены фотографии двух из серии исследованных образ-

цов. КРС и ФЛ являются мощными и неинвазивными инструментами для изучения полупроводниковых ДПМ. На рисунке 1b показан экспериментальный спектр КРС, зарегистрированный в исследуемом объемном кристалле  $WS_2$  при комнатной температуре. Также для сравнения приведены литературные данные по спектрам КРС в материалах  $WS_2$  [12]. Видно, что спектры КРС в настоящем эксперименте и приведенные литературные данные свидетельствуют о достаточно высоком качестве исследуемого нами материала. Об этом свидетельствуют также экспериментальные данные, полученные в результате исследования ФЛ объемного кристалла  $WS_2$  с использованием конфокальной оптики. Спектр ФЛ, зарегистрированный в исследуемом объемном кристалле  $WS_2$  при возбуждении лазером с длиной волны 532 нм при комнатной температуре, представлен на рис. 1с. Внизу на рис. 1с показаны типичные спектры ФЛ в объемном материале и в однослойном материале  $WS_2$ , взятые из литературных данных [13], которые демонстрируют наличие основных линий ФЛ для этого материала в наших спектрах. Справа на рис. 1с условно приведены фрагменты верхней части валентной зоны (VB) и нижней части зоны проводимости (CB) для объемного материала  $WS_2$  (красные линии) и однослойного материала  $WS_2$  (синие пунктирные линии). Соответственно, стрелками указан непрямой переход для объемного материала и прямой переход для однослойного материала.

Следует отметить, что для калибровки интенсивности ФЛ на нашем конфокальном микроскопе также исследовались однослойные образцы ДПМ. В результате унификации параметров эксперимента (мощность лазера, диаметр точечной диафрагмы конфокальной системы (пинхол), время накопления сигнала) показано, что интенсивность ФЛ в объемном материале примерно на 4–5 порядков меньше интенсивности ФЛ в однослойном материале. Это естественный результат зонной структуры объемного и однослойного материала  $WS_2$  (см. рис. 1с).

На рисунке 2а представлена ориентационная зависимость спектров ЭПР, состоящих из трех линий разной интенсивности, индуцированных оптическим облучением (фото-ЭПР), зарегистрированная в диапазоне 94 ГГц при температуре 5 К. Без воздействия света сигналы ЭПР в указанной области магнитных полей не наблюдались.

Спектры ЭПР описываются спиновым гамильтонианом, отражающим электронное зеемановское взаимодействие для парамагнитного центра с аксиальной симметрией в магнитном поле [14]

$$\hat{H} = \mu_B \mathbf{B} \cdot \mathbf{g} \cdot \hat{\mathbf{S}} = \mu_B [g_{\parallel} B_z \hat{S}_z + g_{\perp} (B_x \hat{S}_x + B_y \hat{S}_y)]. \quad (1)$$

Здесь  $\hat{\mathbf{S}}$  – оператор спина электрона с  $S = 1/2$ ,  $g_{\parallel}$  и  $g_{\perp}$  – компоненты анизотропного электронного  $g$ -фактора,  $\mu_B$  – магнетон Бора.

Пунктирными линиями показаны смоделированные зависимости, рассчитанные по формуле  $g^2 = g_{\parallel}^2 \cos^2 \theta + g_{\perp}^2 \sin^2 \theta$ , где  $\theta$  представляет собой угол между направлением магнитного поля и аксиальной осью  $c$ , которая перпендикулярна плоскости кристалла. Для перпендикулярной ориентации магнитного поля относительно оси  $c$  ( $\theta = 90^\circ$ ,  $B \perp c$ ),  $g$ -факторы для всех трех линий ( $g_{\perp}$ ) совпадают в пределах точности эксперимента:  $g_{\perp} = 2.698$ . Интенсивность линий ЭПР падает с отклонением угла  $\theta$  от перпендикулярного направления, при этом линии практически исчезают при отклонениях угла от  $\theta = 90^\circ$  больше 40 градусов, поэтому  $g$ -факторы для  $\theta = 0^\circ$   $g_{\parallel}$  рассчитывались по приведенной выше формуле:  $g_{\parallel 1} = 2.181$  (для интенсивной линии),  $g_{\parallel 2} = 2.124$  (для менее интенсивной линии). Аналогичные ориентационные зависимости трех сигналов ЭПР наблюдались при повороте кристалла в плоскости, перпендикулярной оси  $c$ , что свидетельствует об отсутствии более низкой симметрии парамагнитного центра. Можно привести несколько аргументов о причинах расщепления линий ЭПР. Самый простой, это наличие некоторого несовершенства кристалла, что приводит к незначительному расслоению материала (менее 1 градуса). Также нельзя исключить наличие нескольких политипов материала, так как известно, что в зависимости от компоновки слоев могут быть реализованы три структурные фазы  $WS_2$ , включающие политипы 2H, 3R и 1T [15]. Мы также зарегистрировали ориентационные зависимости сигналов фото-ЭПР в диапазоне 130 ГГц, и получили подобные параметры спектров ЭПР, т.е. спиновый гамильтониан (1) со спином  $S = 1/2$  описывает результаты экспериментов в обоих диапазонах. На вставке рис. 2а представлен фрагмент ориентационной зависимости спектра фото-ЭПР, зарегистрированного в диапазоне 130 ГГц при температуре 5 К. Спектры регистрируются при одинаковых условиях простой заменой микроволнового блока. Отношение магнитных полей, например, для сигналов ЭПР в перпендикулярной ориентации магнитного поля 3.44 Тл на частоте 130 ГГц и 2.49 Тл на частоте 94 ГГц равно 1.38, что соответствует отношению рабочих частот, исключая при этом наличие возможных дополнительных взаимодействий, влияющих на расщепление зеемановских уровней.

На рисунке 2b приведена экспериментальная зависимость падения интенсивности сигнала ЭПР от времени после выключения лазера в результате



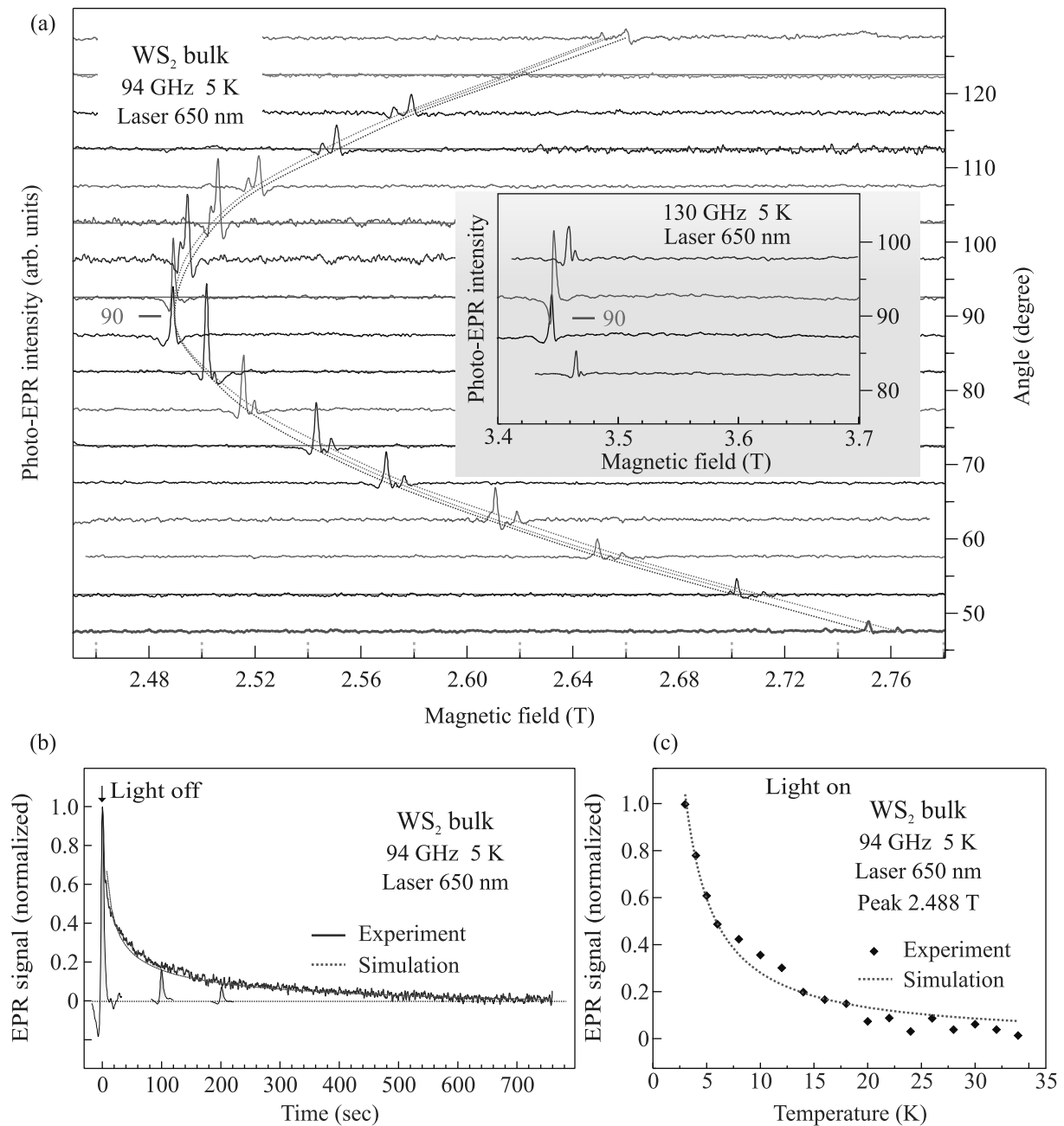


Рис. 2. (Цветной онлайн) (a) – Ориентационная зависимость спектров ЭПР, состоящих из трех линий разной интенсивности, индуцированных оптическим облучением (фото-ЭПР), зарегистрированная в диапазоне 94 ГГц при температуре 5 К. Правая шкала представляет собой угол между направлением магнитного поля и аксиальной осью  $c$ , которая перпендикулярна плоскости кристалла. На вставке представлен фрагмент ориентационной зависимости спектра фото-ЭПР, зарегистрированного в диапазоне 130 ГГц при температуре 5 К. (b) – Экспериментальная зависимость падения интенсивности сигнала ЭПР после выключения лазера в результате рекомбинации созданных светом электронно-дырочных пар. Красным цветом показана зависимость интенсивности сигнала ЭПР от времени после выключения лазера, полученная в соответствии с эмпирическим уравнением Беккереля. (c) – Температурная зависимость интенсивности сигнала фото-ЭПР при непрерывном облучении лазером. Красной пунктирной линией приведена смоделированная зависимость от температуры, близкая к гиперболической кривой в соответствии с законом Кюри

рекомбинации созданных светом электронно-дырочных пар. Красным цветом показана зависи-

мость интенсивности сигнала ЭПР от времени после выключения лазера, полученная в соответствии

с эмпирическим уравнением Беккереля  $I = at^b$ . Рассчитанный коэффициент  $b$  в формуле (2) для гиперболического участка кривой равен  $-0.4$ . По уравнению Беккереля описывается рекомбинационная люминесценция, и в общем случае спад интенсивности соответствует кинетике второго порядка. Мы используем это уравнение для описания рекомбинации долгоживущих парамагнитных центров, образовавшихся под действием лазерного излучения и регистрируемых по сигналу ЭПР. Дробный порядок, полученный экспериментально, может быть связан как с особенностями диффузии фото-возбужденных центров, так и с наличием нескольких центров или нескольких каналов рекомбинации.

На рисунке 2с показана температурная зависимость интенсивности сигнала фото-ЭПР при непрерывном облучении лазером. Красной пунктирной линией показана симулированная зависимость интенсивности ( $I$ ) от температуры, близкая к гиперболической кривой в соответствии с законом Кюри, т.е.  $I \propto T^{-1}$ .

Анизотропия  $g$ -фактора непосредственно связана со спин-орбитальным взаимодействием, которое представляется гигантским в случае тяжелого элемента, такого как вольфрам W. Следует отметить, что основными объектами для ЭПР исследований являются переходные элементы [16], поэтому исследования кристаллов, зонная структура которых формируется переходными элементами и которые не являются магнитными материалами (то есть электронные оболочки замкнуты), представляет особый интерес. Межзонное оптическое возбуждение приводит к образованию электронно-дырочных пар, которые являются парамагнитными.

При аксиальной симметрии реализуется формула для величины  $g$ -фактора в зависимости от угла между направлением магнитного поля и осью парамагнитного центра в случае, если нижнее энергетическое состояние является орбитальным синглетом, и в результате в основном состоянии происходит эффект “замораживания орбитального момента” [14, 16]

$$g_{zz} = g_s + 2\lambda\Lambda_{zz} = g_s - 2\lambda \sum_n' \frac{\langle 0|\hat{L}_x|n\rangle\langle n|\hat{L}_z|0\rangle}{E_n^{(0)} - E_0^{(0)}} = g_s,$$

$$g_{xx} = g_s + 2\lambda\Lambda_{xx} =$$

$$= g_s - 2\lambda \sum_n' \frac{\langle 0|\hat{L}_x|n\rangle\langle n|\hat{L}_x|0\rangle}{E_n^{(0)} - E_0^{(0)}} = g_s - \frac{2\lambda}{\delta},$$

$$\Lambda_{ij} = -\sum_n' \frac{\langle 0|\hat{L}_i|n\rangle\langle n|\hat{L}_j|0\rangle}{E_n^{(0)} - E_0^{(0)}}. \quad (2)$$

Здесь  $g_s = 2.0023$ ,  $\lambda$  – константа спин-орбитального взаимодействия,  $\delta$  – средняя величина расщепления между энергетическими уровнями основного и возбужденных  $[E_n^{(0)}]$  состояний в кристаллическом поле. Этот результат был получен путем представления оператора орбитального момента  $\mathbf{L}$  в виде повышающего и понижающего операторов для конкретных  $d$  волновых функций данной задачи. Результатом качественного рассмотрения выражения (2) является появление анизотропного  $g$ -фактора с различными компонентами для параллельного и перпендикулярного направлений магнитного поля по отношению к аксиальной оси симметрии, величина которых зависит от вклада орбитального момента для возбужденного состояния

$$g_{\parallel} = g_s; \quad g_{\perp} = g_s - 2\lambda/\delta.$$

Следует отметить, что для свободных ионов с  $d$  электронами константа спин-орбитального взаимодействия  $\lambda > 0$ , если  $d$ -оболочка заполнена менее чем на половину, и  $\lambda < 0$ , если  $d$  оболочка заполнена более чем на половину. От величины и знака константы спин-орбитального взаимодействия в кристалле  $WS_2$ , которые отличаются от значений для свободного иона, зависит соотношение между  $g_{\perp}$  и  $g_{\parallel}$ . В наших экспериментах  $g_{\perp} > g_{\parallel}$ , что может быть объектом теоретического рассмотрения свойств локализованной дырки вблизи потолка валентной зоны.

На рисунке 3 показана условная энергетическая диаграмма объемного кристалла  $2H-WS_2$ . Показан процесс фотопоглощения для генерации фотоэлектронов в зоне проводимости и фотодырок в валентной зоне  $2H-WS_2$ . Две стрелки на  $5d$ -орбиталях в валентной зоне представляют исходные  $5d$ -электроны на атоме W. Схема на рис. 3 является условной модификацией схемы, представленной для  $2H-MoS_2$  в работе [17]. Справа на рис. 3 показан переход одного электрона в зону проводимости и соответствующий сигнал ЭПР от оставшейся дырки в валентной зоне. Далее при выключении света происходит рекомбинация электронно-дырочной пары в течение нескольких минут и сигнал ЭПР исчезает. Сигнал ЭПР для центра в зоне проводимости пока не обнаружен, возможно в связи с сильной делокализацией электрона в зоне проводимости.

Как показано на рис. 3,  $2H-WS_2$  имеет симметрию  $D_{3h}$ , а его кристаллическое поле расщепляет пять орбиталей W  $5d$  на три группы: орбиталь  $5d(z^2 - r^2)$ , которая является наиболее стабильной из всех, за которыми следуют две вырожденные орбитали  $5d(xz)$  и  $5d(yz)$  и две вырожденные орбитали  $5d(x^2 - y^2)$  и  $5d(xy)$  (по аналогии со схемой, представленной для

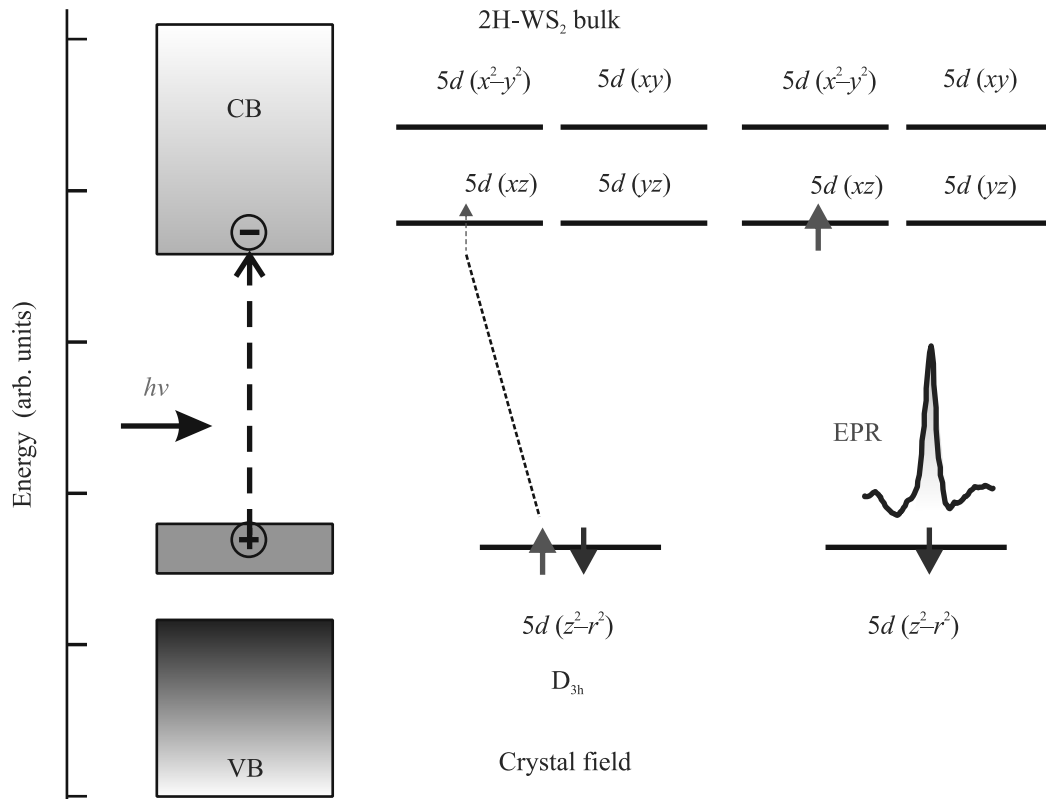


Рис. 3. (Цветной онлайн) Условная энергетическая диаграмма для объемного кристалла 2H-WS<sub>2</sub>. Показан процесс фотопоглощения для генерации фотоэлектронов в зоне проводимости (CB) и фотодырок в валентной зоне (VB) 2H-WS<sub>2</sub>. Стрелки на 5d-орбиталях представляют исходные два 5d-электрона на атоме W. Справа на рисунке показан переход одного электрона в зону проводимости и соответствующий сигнал ЭПР от оставшейся дырки в валентной зоне. Далее при выключении света происходит рекомбинация электронно-дырочной пары в течение нескольких минут, и сигнал ЭПР исчезает

MoS<sub>2</sub> [17]. Ион W находится в степени окисления +4 и имеет два 5d-электрона, оба из которых находятся на нижних уровнях  $5d(z^2 - r^2)$  и оставляют пустыми 5d-орбитали с более высокой энергией. Полное заполнение  $5d(z^2 - r^2)$ , которое соответствует валентной зоне в его электронной зонной структуре, делает 2H-WS<sub>2</sub> полупроводниковым материалом.

Расчеты с использованием теории функционала плотности (*density functional theory* – DFT) [18] показывают, что валентная зона в  $\Gamma$  точке WS<sub>2</sub> происходит в основном от орбиталей  $5d(z^2 - r^2)$  вольфрама W и  $3p(z)$  серы S. По мере увеличения толщины ДПМ от одиночного слоя к объемному материалу взаимодействие между пакетированными слоями WS<sub>2</sub> сначала приводит к появлению последовательности полос вблизи потолка валентной зоны. В результате в объемном материале эти подполосы сливаются в объемную полосу (см. рис. 3). Поскольку максимум валентной зоны расположен в точке  $\Gamma$  в объемном материале, расстояние и эффективная дырочная масса

этой последовательности полос важны для определения общих электронных свойств слоистого WS<sub>2</sub>.

Для применений в спинтронике одним из наиболее важных свойств WS<sub>2</sub> является гигантское спин-орбитальное расщепление в верхней части валентной зоны. Величина спин-орбитального расщепления увеличивается с атомным номером переходного металла Z, так как вершина валентной зоны происходит преимущественно от d оболочки переходного металла. Эта величина также незначительно зависит от толщины материала и изменяется в пределах 425–577 мэВ [18]. Экспериментально определенное спин-орбитальное расщепление для объемного WS<sub>2</sub> (0001) составляет  $\sim 450$  мэВ. Соответствующие величины для MoS<sub>2</sub>  $\sim 200$  мэВ и WSe<sub>2</sub>  $\sim 500$  мэВ, т.е. видно, что основной вклад в спин-орбитальное взаимодействие вносит переходной металл [18]. Следует отметить, что спин-орбитальное расщепление уровней в зоне проводимости более чем на порядок меньше, чем упомянутое расщепление в валентной зоне,

это также поддерживает нашу идентификацию наблюдаемых спектров фото-ЭПР как принадлежащих дырочным центрам вблизи потолка валентной зоны. Традиционный ЭПР не может быть применен для изучения одиночных слоев  $WS_2$  из-за его сравнительно низкой чувствительности, однако наличие сильной ФЛ в этих структурах дает основание предположить, что можно будет наблюдать оптически детектируемый магнитный резонанс (ОДМР) носителей и экситонов в отдельных слоях  $WS_2$  благодаря гигантскому спин-орбитальному взаимодействию для  $5d$  электронов вольфрама.

В результате нами были обнаружены анизотропные спектры ЭПР в монокристалле  $WS_2$ , индуцированные оптическим возбуждением. Сделан вывод, что упомянутые спектры ЭПР принадлежат локализованным носителям вблизи валентной зоны, и отражают особенности  $5d$  оболочки кристалла. Показано, что  $g$ -фактор для перпендикулярной ориентации магнитного поля относительно аксиальной оси симметрии кристалла (магнитное поле ориентировано в плоскости слоя) больше, чем для параллельной ориентации магнитного поля (перпендикулярно плоскости слоя), что может дать информацию о типе  $5d$  функции вблизи потолка валентной зоны. Наиболее вероятно, что мы имеем  $5d(z^2 - r^2)$  волновую функцию, которую можно будет связать с валентной зоной кристалла. При выключении света происходит сравнительно медленная рекомбинация электронно-дырочных пар и спектр ЭПР исчезает с постоянной времени несколько минут при температуре примерно 5 К.

Мы благодарны В. А. Солтамову за предоставление образцов объемных кристаллов  $WS_2$  и стимулирующие дискуссии.

1. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, *Science* **306**(5696), 666 (2004); DOI: 10.1126/science.1102896.
2. K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov, and A. K. Geim, *Proc. Natl Acad. Sci. USA* **102**, 10451 (2005).
3. P. Avouris, T. F. Heinz, and T. Low, *2D materials: Properties and devices*, Cambridge University Press, Cambridge; <https://doi.org/10.1017/9781316681619>.
4. A. Chaves, J. G. Azadani, H. Alsalman, D. R. da Costa, R. Frisenda, A. J. Chaves, S. H. Song, Y. D. Kim, D. He, J. Zhou, A. Castellanos-Gomez, F. M. Peeters, Zh. Liu, C. L. Hinkle, S.-H. Oh, P. D. Ye, S. J. Koester, Y. H. Lee, Ph. Avouris, X. Wang, and T. Low, *npj 2D Mater. Appl.* **4**(29) (2020); <https://doi.org/10.1038/s41699-020-00162-4>.
5. А. Б. Логинов, Р. Р. Исмагилов, С. Н. Бокова-Сирош, И. В. Божьев, Е. Д. Образцова, Б. А. Логинов, А. Н. Образцов, *ЖТФ* **91**, 1509 (2021); DOI: <https://doi.org/10.21883/JTF.2021.10.51364.102-21>.
6. В. Л. Калихман, Я. С. Уманский, *УФН* **108**, 503 (1972).
7. E. C. Ahn, *Npj 2D Mater. Appl.* **4**(1), 1 (2020); DOI: 10.1038/s41699-020-0152-0.
8. A. Kumar, D. Yagodkin, N. Stetzuhn, S. Kovalchuk, A. Melnikov, P. Elliott, S. Sharma, C. Gahl, and K. I. Bolotin, *Nano Lett.* **21**, 7123 (2021).
9. К. В. Лихачев, И. Д. Бреев, С. В. Кидалов, П. Г. Баранов, С. С. Нагалюк, А. В. Анкудинов, А. Н. Анисимов, *Письма в ЖЭТФ* **116**(11), 810 (2022).
10. E. V. Edinach, Yu. A. Uspenskaya, A. S. Gurin, R. A. Babunts, H. R. Asatryan, N. G. Romanov, A. G. Badalyan, and P. G. Baranov, *Phys. Rev. B* **100**, 104435 (2019).
11. Р. А. Бабунц, А. С. Гурин, И. В. Ильин, А. П. Бундакова, М. В. Музафарова, А. Г. Бадалян, Н. Г. Романов, П. Г. Баранов, *ФТТ* **63**(11), 1906 (2021).
12. H. Zobeiri, S. Xu, Y. Yue, Q. Zhang, Y. Xie, and X. Wang, *Effect of temperature on Raman intensity of nm-thick WS<sub>2</sub>: combined effects of resonance Raman, optical properties, and interface optical interference*, *Nanoscale*, The Royal Society of Chemistry **12**(10), 6064 (2020); DOI: 10.1039/c9nr10186a rsc.li/nanoscale.
13. H. Zeng, G.-B. Liu, J. Dai, Y. Yan, B. Zhu, R. He, L. Xie, S. Xu, X. Chen, W. Yao, and X. Cui, *Sci. Rep.* **3**, 1608 (2013); DOI: 10.1038/srep01608.
14. P. G. Baranov, H.-J. von Bardeleben, F. Jelezko, and J. Wrachtrup, *Magnetic Resonance of Semiconductors and Their Nanostructures: Basic and Advanced Applications*, Springer Series in Materials Science, Springer-Verlag, GmbH, Austria (2017), v. 253.
15. Q. Cheng, J. Pang, D. Sun, J. Wang, S. Zhang, F. Liu, Y. Chen, R. Yang, N. Liang, X. Lu, Y. Ji, J. Wang, C. Zhang, Y. Sang, H. Liu, and W. Zhou, *InfoMat.* **2**(4), 656 (2020); [wileyonlinelibrary.com/journal/inf2](https://doi.org/10.1002/inf2.12093); <https://doi.org/10.1002/inf2.12093>.
16. A. Abragam and B. Bleaney, *Electron Paramagnetic Resonance of Transition Ions*, Clarendon Press, Oxford (1970).
17. P. Byrley, M. Liu, and R. Yan, *Front. Chem.* **7**, 442 (2019); doi: 10.3389/fchem.2019.00442.
18. I. Tanabe, M. Gomez, W. C. Coley, D. Le, El. M. Echeverria, G. Stecklein, V. Kandyba, S. K. Balijepalli, V. Klee, A. E. Nguyen, E. Preciado, I.-H. Lu, S. Bobek, D. Barroso, D. Martinez-Ta, A. Barinov, T. S. Rahman, P. A. Dowben, P. A. Crowell, and L. Bartels, *Appl. Phys. Lett.* **108**, 252103 (2016); <https://doi.org/10.1063/1.4954278>.

# Экситонное упорядочение в сильно коррелированных системах со спиновым кроссовером

Ю. С. Орлов<sup>+\*1)</sup>, С. В. Николаев<sup>+\*</sup>, С. Г. Овчинников<sup>+\*</sup>

<sup>+</sup> Сибирский федеральный университет, 660041 Красноярск, Россия

<sup>\*</sup> Институт физики им. Л. В. Киренского, Федеральный исследовательский центр “Красноярский научный центр” Сибирского отделения РАН, 660036 Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 22 марта 2023 г.

После переработки 31 марта 2023 г.

Принята к публикации 4 апреля 2023 г.

В рамках эффективного гамильтониана, полученного из двухзонной модели Хаббарда–Канамори, рассматриваются особенности формирования магнитной структуры и фазы экситонного бозе-конденсата локальных магнитных экситонов в сильно коррелированных системах вблизи спинового кроссовера. Обнаружено сосуществование антиферромагнетизма и экситонного конденсата и возникновение дальнего антиферромагнитного порядка вследствие экситонного упорядочения даже в отсутствие межатомного обменного взаимодействия. Рассматривается роль электрон-фононного взаимодействия.

DOI: 10.31857/S1234567823090112, EDN: bpqdvu

**1. Введение.** Экситонная конденсация и состояние экситонного диэлектрика исследуются довольно давно, начиная с теоретических работ [1–3]. В работе Келдыша и Копаева [3] было показано, что модифицированный формализм Бардина–Купера–Шриффера (БКШ) теории сверхпроводимости может быть эффективно использован для описания фазовых переходов металл–диэлектрик в полуметаллах. Фазовый переход в модели возникает при сколь угодно слабом межэлектронном взаимодействии и, по аналогии со сверхпроводящим переходом, может быть интерпретирован как бозе-конденсация слабо-связанных электрон–дырочных пар (экситонов большого радиуса). Модель экситонного диэлектрика Келдыша–Копаева стала, по сути, стандартной схемой описания межэлектронных корреляций в пределе слабого взаимодействия. В рамках этой модели были определены условия для формирования фазы экситонного ферромагнетизма [4] в полуметаллах. Позже в литературе активно обсуждалась конденсация экситонов в сильно коррелированных системах (см., например, [5–13]). В последнее время получило развитие новое направление в области экситонного магнетизма, связанное с относительно близким расположением по энергии основного синглетного и возбужденного триплетного ионных состояний в диэлектриках Мотта–Хаббарда [14] (некоторые недавно полученные интересные результаты в области экс-

тонного магнетизма можно найти, например, в [15–17]). В настоящей работе рассматриваются особенности формирования экситонного конденсата, представляющего собой конденсацию локальных (на узле кристаллической решетки) магнитных экситонов (экситонов малого радиуса), в сильно коррелированных системах вблизи спинового кроссовера. Результаты, представленные в статье, получены с помощью техники  $X$ -операторов Хаббарда для двухзонной модели Хаббарда–Канамори. Обнаружено возникновение дальнего антиферромагнитного порядка вследствие экситонного упорядочения даже в отсутствие межатомного обменного взаимодействия. Исследована роль электрон-фононного взаимодействия. Показано, что в отличие от диагонального, недиагональное электрон-фононное взаимодействие приводит к изменению симметрии экситонного параметра порядка и его конкуренции с антиферромагнетизмом.

**2. Эффективный гамильтониан.** Минимальной моделью сильнокоррелированных систем со спиновым кроссовером является двухзонная модель Хаббарда–Канамори. Гамильтониан модели может быть представлен в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_\Delta + \hat{H}_t + \hat{H}_{\text{Coulomb}}. \quad (1)$$

Здесь первое слагаемое

$$\hat{H}_\Delta = \varepsilon_1 \sum_{i,\gamma} c_{1i\gamma}^\dagger c_{1i\gamma} + \varepsilon_2 \sum_{i,\gamma} c_{2i\gamma}^\dagger c_{2i\gamma} \quad (2)$$

<sup>1)</sup> e-mail: jso.krasn@mail.ru

содержит одноионную энергию электронов в одночастичных состояниях с уровнями энергии  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2 = \varepsilon_1 + \Delta$ , где  $\Delta$  – энергия электронов в кристаллическом поле (из соображений удобства можно положить  $\varepsilon_1 = 0$ ),  $i$  – номер узла решетки,  $\gamma = \pm 1/2$  – проекция спина электрона. Второе слагаемое

$$\hat{H}_t = t_{11} \sum_{\langle i,j \rangle, \gamma} c_{1i\gamma}^\dagger c_{1j\gamma} + t_{22} \sum_{\langle i,j \rangle, \gamma} c_{2i\gamma}^\dagger c_{2j\gamma} + t_{12} \sum_{\langle i,j \rangle, \gamma} \left( c_{2i\gamma}^\dagger c_{1j\gamma} + c_{1i\gamma}^\dagger c_{2j\gamma} \right), \quad (3)$$

где  $t_{\lambda\lambda'}$  – параметры перескока ( $\lambda, \lambda' = 1, 2$  – орбитальный индекс) описывают перескок электронов между ближайшими соседними узлами кристаллической решетки с уровнями энергии  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$ . Третье слагаемое

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{Coulomb}} = & U \sum_{\lambda, i} c_{\lambda i \uparrow}^\dagger c_{\lambda i \downarrow}^\dagger c_{\lambda i \uparrow} c_{\lambda i \downarrow} \\ & + V \sum_{\lambda \neq \lambda', i} c_{\lambda i \uparrow}^\dagger c_{\lambda' i \downarrow}^\dagger c_{\lambda i \uparrow} c_{\lambda' i \downarrow} \\ & + V \sum_{\lambda > \lambda', i, \gamma} c_{\lambda i \gamma}^\dagger c_{\lambda' i \gamma}^\dagger c_{\lambda i \gamma} c_{\lambda' i \gamma} \\ & + J_H \sum_{\lambda > \lambda', i, \gamma} c_{\lambda i \gamma}^\dagger c_{\lambda' i \gamma}^\dagger c_{\lambda' i \gamma} c_{\lambda i \gamma} \\ & + J_H \sum_{\lambda \neq \lambda', i} c_{\lambda i \uparrow}^\dagger c_{\lambda' i \downarrow}^\dagger c_{\lambda' i \uparrow} c_{\lambda i \downarrow} \\ & + J'_H \sum_{\lambda \neq \lambda', i} c_{\lambda i \uparrow}^\dagger c_{\lambda' i \downarrow}^\dagger c_{\lambda' i \uparrow} c_{\lambda i \downarrow} \end{aligned} \quad (4)$$

содержит одноузельную энергию кулоновского взаимодействия электронов (электрон-электронное взаимодействие рассматривается в приближении Канамори с диагональным по орбитальным индексам матричным элементом  $U$  и недиагональным  $V$ , а также хундовскими параметрами обменного взаимодействия  $J_H, J'_H$  [18]).

Важной особенностью такой двухорбитальной модели является возможность формирования в случае половинного заполнения ( $N_e = 2$  – среднее число электронов на узел кристаллической решетки) и в нулевом приближении по межузельным перескокам  $t_{\lambda\lambda'} = 0$  различных локализованных многоэлектронных (двухчастичных) состояний (термов), которые характеризуются значениями спина  $S = 0, 1$  и кроссовера между ними с ростом  $\Delta$ . В области  $\Delta < \Delta_C = \sqrt{(U - V + J_H)^2 + J'_H{}^2}$  основным является триплетное ( $S = 1$ ) HS-состояние

$|\sigma\rangle$  с энергией  $E_{HS}$ , трехкратно вырожденное по проекции спина  $\sigma = 0, \pm 1$ :

$$|\sigma\rangle = \begin{cases} a_{1\uparrow}^\dagger a_{2\uparrow}^\dagger |0\rangle, \sigma = +1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left( a_{1\uparrow}^\dagger a_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle + a_{1\downarrow}^\dagger a_{2\uparrow}^\dagger |0\rangle \right), \sigma = 0, \\ a_{1\downarrow}^\dagger a_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle, \sigma = -1 \end{cases}$$

а при  $\Delta > \Delta_C$  основным является синглетное ( $S = 0$ ) LS-состояние  $|s\rangle = C_1(\Delta) a_{1\uparrow}^\dagger a_{1\downarrow}^\dagger |0\rangle - C_2(\Delta) a_{2\uparrow}^\dagger a_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle$  с энергией  $E_{LS}$ , где  $C_1(\Delta) = \sqrt{1 - C_2^2(\Delta)}$ ,  $C_2(\Delta) = x/2(1 + x + \sqrt{1 + x})$  – нормировочные коэффициенты ( $x = J_H^2 / \Delta^2$ ).

Для вывода эффективного гамильтониана удобно использовать  $X$ -операторы Хаббарда  $X^{p,q} = |p\rangle \langle q|$  [19], построенные на собственных состояниях гамильтониана  $\hat{H}_\Delta + \hat{H}_{\text{Coulomb}}$

$$\left( \hat{H}_\Delta + \hat{H}_{\text{Coulomb}} \right) |p\rangle = E_p |p\rangle \quad (5)$$

с различным числом электронов  $N_e = 0, 1, 2, 3, 4$ . Поскольку операторы Хаббарда образуют линейно независимый базис, то любой локальный оператор может быть выражен через линейную комбинацию  $X$ -операторов, в том числе одноэлектронный оператор уничтожения (рождения):

$$c_{\lambda i \gamma} = \sum_{pq} |p\rangle \langle p| c_{\lambda i \gamma} |q\rangle \langle q| = \sum_{pq} \chi_{\lambda\gamma}(p, q) X_i^{p,q}. \quad (6)$$

Или, поскольку число введенных Зайцевым [20] различных корневых векторов  $(p, q)$  конечно, можно их пронумеровать и каждому вектору поставить в соответствие его номер  $m$ , имеющему смысл зонного индекса локальных фермиевских квазичастиц. Тогда  $c_{i\lambda\gamma} = \sum_m \chi_{\lambda\gamma}(m) X_i^m$ ,  $c_{i\lambda\gamma}^\dagger = \sum_m \chi_{\lambda\gamma}^*(m) X_i^{m\dagger}$ . С помощью (6) аномальные средние  $\langle a_{2f\gamma}^\dagger a_{1f\gamma} \rangle$  (без переворота спина) и  $\langle a_{2f\bar{\gamma}}^\dagger a_{1f\gamma} \rangle$  (с переворотом спина,  $\bar{\gamma} = -\gamma$ ) могут быть представлены в виде

$$\langle c_{2f\gamma}^\dagger c_{1f\gamma} \rangle \approx -\gamma\sqrt{2} \left( C_2 \langle X_f^{s,0} \rangle + C_1 \langle X_f^{0,s} \rangle \right), \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \langle c_{2f\bar{\gamma}}^\dagger c_{1f\gamma} \rangle \approx & 2\gamma \left( \gamma - \frac{1}{2} \right) \left( C_2 \langle X_f^{s,-1} \rangle + C_1 \langle X_f^{-1,s} \rangle \right) \\ & - 2\gamma \left( \gamma + \frac{1}{2} \right) \left( C_2 \langle X_f^{s,+1} \rangle + C_1 \langle X_f^{+1,s} \rangle \right). \end{aligned} \quad (8)$$

В выражениях (7) и (8) отброшены средние от  $X$ -операторов, построенных на состояниях с числом электронов 1 и 3 (одно и трехчастичные состояния). Мы рассматриваем случай половинного заполнения

(двухчастичные состояния) с фиксированным числом электронов на узел кристаллической решетки (гомополярная модель твердого тела), поэтому вклад таких средних пренебрежимо мал.

Как видно из формул (7) и (8), экситонное спаривание описывается ненулевыми средними синглет-триплетных возбуждений. Здесь и ниже угловые скобки  $\langle \dots \rangle$  обозначают термодинамическое среднее. В представлении  $X$ -операторов Хаббарда гамильтониан (1) имеет вид:

$$\hat{H} = \sum_{i,p} E_p X_i^{p,p} + \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{mn} t^{mn} X_i^{m\dagger} X_j^n. \quad (9)$$

Здесь  $E_p$  – энергия многоэлектронных термов,  $t^{mn} = \sum_{\lambda,\lambda',\gamma} t_{\lambda\lambda'} \chi_{\lambda\gamma}^*(m) \chi_{\lambda'\gamma}(n)$  – перенормированные параметры перескока.

Используя гамильтониан (9) как исходный, мы можем получить эффективный гамильтониан, исключив из него межзонные перескоки. Для этого используем метод проекционных операторов, развитый в работе [21] для модели Хаббарда и в [22] для  $p$ - $d$ -модели (см. также [5, 6]). Эффективный гамильтониан имеет вид

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \hat{H}_S + \hat{H}_{n_{LS}n_{HS}} + \hat{H}_{ex}. \quad (10)$$

Здесь первое слагаемое – гамильтониан гейзенберговского типа содержит межатомное обменное взаимодействие

$$\hat{H}_S = \frac{1}{2} J \sum_{\langle i,j \rangle} \left( \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j - \frac{1}{4} \hat{n}_i \hat{n}_j \right), \quad (11)$$

где  $\hat{\mathbf{S}}_i$  – оператор спина  $S = 1$ :  $\hat{S}_i^+ = \sqrt{2} (X_i^{+1,0} + X_i^{0,-1})$ ,  $\hat{S}_i^- = \sqrt{2} (X_i^{0,+1} + X_i^{-1,0})$  и  $\hat{S}_i^z = X_i^{+1,+1} - X_i^{-1,-1}$  [23];  $J = (t_{11}^2 + 2t_{12}^2 + t_{22}^2)/\Omega_g$  – величина межатомного обменного взаимодействия,  $\Omega_g$  – энергия переноса заряда между центрами верхних и нижних хаббардовских подзон [21, 22];  $\hat{n}_i = 2 \left( X_i^{s,s} + \sum_{\sigma} X_i^{\sigma,\sigma} \right) = 2 (\hat{n}_i^{LS} + \hat{n}_i^{HS})$  – оператор числа частиц на узле  $i$  ( $\hat{n}_i^{LS(HS)}$  – оператор числа заполнения LS(HS)-состояния). Используя условие полноты  $X^{s,s} + \sum_{\sigma} X^{\sigma,\sigma} = 1$ , можно показать, что  $\langle \hat{n}_i \rangle = 2 (\langle \hat{n}_i^{LS} \rangle + \langle \hat{n}_i^{HS} \rangle) = 2 (n_{LS} + n_{HS}) = 2$ , где  $n_{LS(HS)}$  – среднее число частиц в LS(HS)-состоянии ( $n_{LS} + n_{HS} = 1$ ).

Второе слагаемое

$$\hat{H}_{n_{LS}n_{HS}} = \frac{1}{2} \tilde{J} \sum_{\langle i,j \rangle} X_i^{s,s} \cdot X_j^{s,s} \quad (12)$$

описывает взаимодействие типа плотность–плотность низкоспиновых состояний,  $\tilde{J} = \left[ 1 - (2C_1 C_2)^2 \right] (t_{11}^2 - 2t_{12}^2 + t_{22}^2)/\Omega_g$ .

Третий член в (10) содержит межатомный перескок экситонов с амплитудой  $J'_{ex}$  и рождение/уничтожение на соседних узлах биэкситонов с амплитудой  $J''_{ex}$  с учетом энергии электронных конфигураций LS- и HS-состояний

$$\begin{aligned} \hat{H}_{ex} = & -\frac{\varepsilon_S}{2} \sum_i \left( X_i^{s,s} - \sum_{\sigma=-S}^{+S} X_i^{\sigma,\sigma} \right) + \\ & + \sum_{\sigma} \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ \frac{1}{2} J'_{ex} (X_i^{\sigma,s} X_j^{s,\sigma} + X_i^{s,\sigma} X_j^{\sigma,s}) - \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} J''_{ex} (-1)^{|\sigma|} (X_i^{\sigma,s} X_j^{\bar{\sigma},s} + X_i^{s,\sigma} X_j^{s,\bar{\sigma}}) \right], \quad (13) \end{aligned}$$

где  $\varepsilon_S = E_{HS} - E_{LS}$  – спиновая щель, в отсутствие всех кооперативных взаимодействий отрицательному значению спиновой щели соответствует основное HS-состояние, а в случае положительной спиновой щели в качестве основного состояния реализуется LS-состояние;  $J'_{ex} = 2C_1 C_2 (t_{11} t_{22} - t_{12}^2)/\Omega_g$ ,  $J''_{ex} = (t_{11} t_{22} - t_{12}^2)/\Omega_g$ ,  $\bar{\sigma} = -\sigma$ . В (13) операторы Хаббарда  $X_i^{\sigma,s}$  и  $X_i^{s,\sigma}$  описывают возбуждения бозе-типа (экситоны) на узле  $i$  из низкоспинового синглетного состояния  $|s\rangle$  в высокоспиновое триплетное  $|\sigma\rangle$  с проекцией спина  $\sigma = 0, \pm 1$ , и наоборот. Первое слагаемое в квадратных скобках (13) описывает дисперсию экситонов за счет межатомных перескоков, такая дисперсия была рассмотрена еще в работе Вонсовского и Свирского [24]. Второе слагаемое в (13) содержит рождение и уничтожение биэкситонов на соседних узлах решетки  $(i, j)$ , что сразу усложняет дисперсию экситонов по сравнению с обычной в методе сильной связи [24]. Вблизи спинового кроссовера  $C_1 \approx 1$ , а  $C_2 \approx 0$ , поэтому  $J'_{ex} \approx 0$ . В этих условиях биэкситонные возбуждения играют главную роль в формировании дисперсии экситонов. Гамильтониан (13) описывает кинетическое экситон-экситонное взаимодействие [25] в представлении  $X$ -операторов Хаббарда.

Если ввести обозначения  $\hat{d}_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (-\hat{d}_+ + \hat{d}_-)$ ,  $\hat{d}_y = \frac{1}{\sqrt{2}i} (\hat{d}_+ + \hat{d}_-)$ ,  $\hat{d}_z = \hat{d}_0$  [11], где  $\hat{d}_+ = X^{s,+}$ ,  $\hat{d}_- = X^{s,-}$ ,  $\hat{d}_0 = X^{s,0}$ , то последнее слагаемое в (13) можно представить в виде

$$\frac{1}{2} J'_{ex} \sum_{\langle i,j \rangle} \left( \hat{\mathbf{d}}_i^\dagger \cdot \hat{\mathbf{d}}_j + \hat{\mathbf{d}}_i \cdot \hat{\mathbf{d}}_j^\dagger \right) - \frac{1}{2} J''_{ex} \sum_{\langle i,j \rangle} \left( \hat{\mathbf{d}}_i^\dagger \cdot \hat{\mathbf{d}}_j^\dagger + \hat{\mathbf{d}}_i \cdot \hat{\mathbf{d}}_j \right). \quad (14)$$

Вектор  $\hat{\mathbf{d}} = (\hat{d}_x, \hat{d}_y, \hat{d}_z)$  соответствует так называемому

тому  $\mathbf{d}$ -вектору в теории триплетной сверхпроводимости.

**3. Фазовые диаграммы в приближении среднего поля.** В приближении среднего поля (MF) для двух подрешеток  $A$  и  $B$  слагаемые (11)–(13) принимают вид (15)–(17) соответственно:

$$\begin{aligned} \hat{H}_S^{MF} = & zJm_B \sum_{i_A} \hat{S}_{i_A}^z + zJm_A \sum_{i_B} \hat{S}_{i_B}^z - \\ & - zJ\frac{1}{4}n_B \sum_{i_A} \hat{n}_{i_A} - zJ\frac{1}{4}n_A \sum_{i_B} \hat{n}_{i_B} - \\ & - \frac{1}{2}zJNm_Am_B + \frac{1}{2}zJN, \end{aligned} \quad (15)$$

здесь  $z$  – число ближайших соседей,  $m_{A(B)} = \langle \hat{S}_{i_{A(B)}}^z \rangle$  – намагниченность подрешетки  $A(B)$ ;

$$\begin{aligned} \hat{H}_{n_{LS}n_{LS}}^{MF} = & z\tilde{J}n_{LS,B} \sum_{i_A} \hat{n}_{i_A}^{LS} + z\tilde{J}n_{LS,A} \sum_{i_B} \hat{n}_{i_B}^{LS} - \\ & - z\tilde{J}\frac{N}{2}n_{LS,A}n_{LS,B}. \end{aligned} \quad (16)$$

Взаимодействие  $\tilde{J}$  приводит к дополнительному механизму кооперативности и стабилизирует HS-состояние.

$$\begin{aligned} \hat{H}_{ex}^{MF} = & \sum_F \sum_{\sigma=\pm 1,0} \left\{ zJ'_{ex} \Delta_{ex,\bar{F}}^\sigma \sum_{i_F} (X_{i_F}^{s,\sigma} + X_{i_F}^{\sigma,s}) - \right. \\ & - (-1)^{|\sigma|} zJ''_{ex} \Delta_{ex,\bar{F}}^\sigma \sum_{i_F} (X_{i_F}^{s,\bar{\sigma}} + X_{i_F}^{\bar{\sigma},s}) - \\ & \left. - \frac{1}{2}zN \left( J'_{ex} \Delta_{ex,F}^\sigma \Delta_{ex,\bar{F}}^\sigma - (-1)^{|\sigma|} J''_{ex} \Delta_{ex,F}^\sigma \Delta_{ex,\bar{F}}^{\bar{\sigma}} \right) \right\} \\ & - \varepsilon_S \sum_{i_A} X_{i_A}^{s,s} - \varepsilon_S \sum_{i_B} X_{i_B}^{s,s} + N\frac{\varepsilon_S}{2}, \end{aligned} \quad (17)$$

где  $F = A, B$  ( $\bar{F} = A$ , если  $F = B$ , и наоборот).  $\Delta_{ex,A(B)}^\sigma = \langle X_{i_{A(B)}}^{s,\sigma} \rangle$  – компоненты экситонного параметра порядка, для которых в термодинамически равновесном состоянии справедливо равенство:  $(\Delta_{ex}^\sigma)^\dagger = \langle X^{\sigma,s} \rangle = \Delta_{ex}^\sigma$ . Отметим, что отличие от нуля средних  $\Delta_{ex}^\sigma \neq 0$  означает квантовомеханическое смешивание LS- и HS-состояний, но в отсутствие спин-орбитального взаимодействия.

Решая задачу на собственные значения

$$\hat{H}_{eff}^{MF} |\psi_k\rangle = E_k |\psi_k\rangle, \quad (18)$$

где  $|\psi_k\rangle = C_{LS,k} |s\rangle + \sum_\sigma C_{HS,k,\sigma} |\sigma\rangle$  – собственные состояния гамильтониана  $\hat{H}_{eff}^{MF} = \hat{H}_S^{MF} + \hat{H}_{nn}^{MF} + \hat{H}_{ex}^{MF}$ , и используя решения, отвечающие минимуму свободной энергии  $F = -k_B T \ln Z$ , где  $Z = \sum_k e^{-E_k/k_B T}$  –

статистическая сумма системы, можно вычислить различные термодинамические средние, входящие в  $\hat{H}_{eff}^{MF}$ :

$$\begin{aligned} \Delta_{ex,A(B)}^\sigma &= \frac{1}{Z} \sum_k \langle \psi_k | X_{i_{A(B)}}^{s,\sigma} | \psi_k \rangle e^{-E_k/k_B T}, \\ m_{A(B)} &= \frac{1}{Z} \sum_k \langle \psi_k | S_{i_{A(B)}}^z | \psi_k \rangle e^{-E_k/k_B T}, \\ n_{HS,A(B)} &= \frac{1}{Z} \sum_k \left\langle \psi_k \left| \sum_\sigma X_{i_{A(B)}}^{\sigma,\sigma} \right| \psi_k \right\rangle e^{-E_k/k_B T}. \end{aligned}$$

Тем самым при решении (18) мы имеем дело с самосогласованной задачей нахождения собственных состояний и собственных значений эффективного гамильтониана в приближении среднего поля.

На рисунке 1 (справа приведены результаты в увеличенном масштабе вблизи кроссовера) представлены рассчитанные фазовые диаграммы заселенности HS-состояния  $n_{HS}$  (верхний ряд), намагниченности  $m$  (средний ряд), компонентов экситонного параметра порядка  $\Delta^{+/-}$  (нижний ряд) для двух подрешеток  $A$  и  $B$  в координатах температура  $T$ –спиновая щель  $\varepsilon_S$ . Расчеты были выполнены при  $J = J_0 = 28$  К [26]. Здесь температура приведена в единицах температуры Нееля  $T_N = zJ_0 \frac{S(S+1)}{3}$  ( $S = 1$ ), а спиновая щель – в единицах обменного интеграла  $J_0$ . В системе реализуется дальний антиферромагнитный порядок (рис. 1c, d),  $m_A = -m_B$ . Видно, что из-за наличия кооперативного обменного взаимодействия  $J$  в системе сохраняется основное магнитоупорядоченное антиферромагнитное HS-состояние, AFM(HS), вплоть до  $\varepsilon_S = \varepsilon_S^c \approx 4J_0$  (рис. 1c, d), несмотря на то, что в одноионной картине при  $\varepsilon_S > \varepsilon_S^c = 0$  основным является LS-состояние. Увеличение критического  $\varepsilon_S^c$  за счет кооперативных эффектов вполне понятен, так как обменное взаимодействие  $J$  и взаимодействие  $\tilde{J}$  стабилизируют HS-состояние, понижая его энергию. При  $\varepsilon_S > \varepsilon_S^c$  основное антиферромагнитное HS-состояние сменяется диамагнитным LS-состоянием, DM(LS) (рис. 1c, d).

На диаграммах видно существование двух особых точек: трикритической точки ( $T^*$  и  $\varepsilon_S^*$  на рис. 1b), в которой линия фазового перехода 2-го рода непрерывно переходит в линию фазового перехода 1-го рода и бикритической ( $T^{**}$  и  $\varepsilon_S^{**}$  на рис. 1b), в которой линия фазового перехода 1-го рода разделяется на две линии фазовых переходов 2-го рода в соответствии с правилом фаз Гиббса.

При  $\varepsilon_S^c < \varepsilon_S < \varepsilon_S^{c2}$  (рис. 1f) появляется область экситонного конденсата, которая сосуществует с дальним антиферромагнитным порядком (рис. 1d). Более того, формирование экситонного конденсата



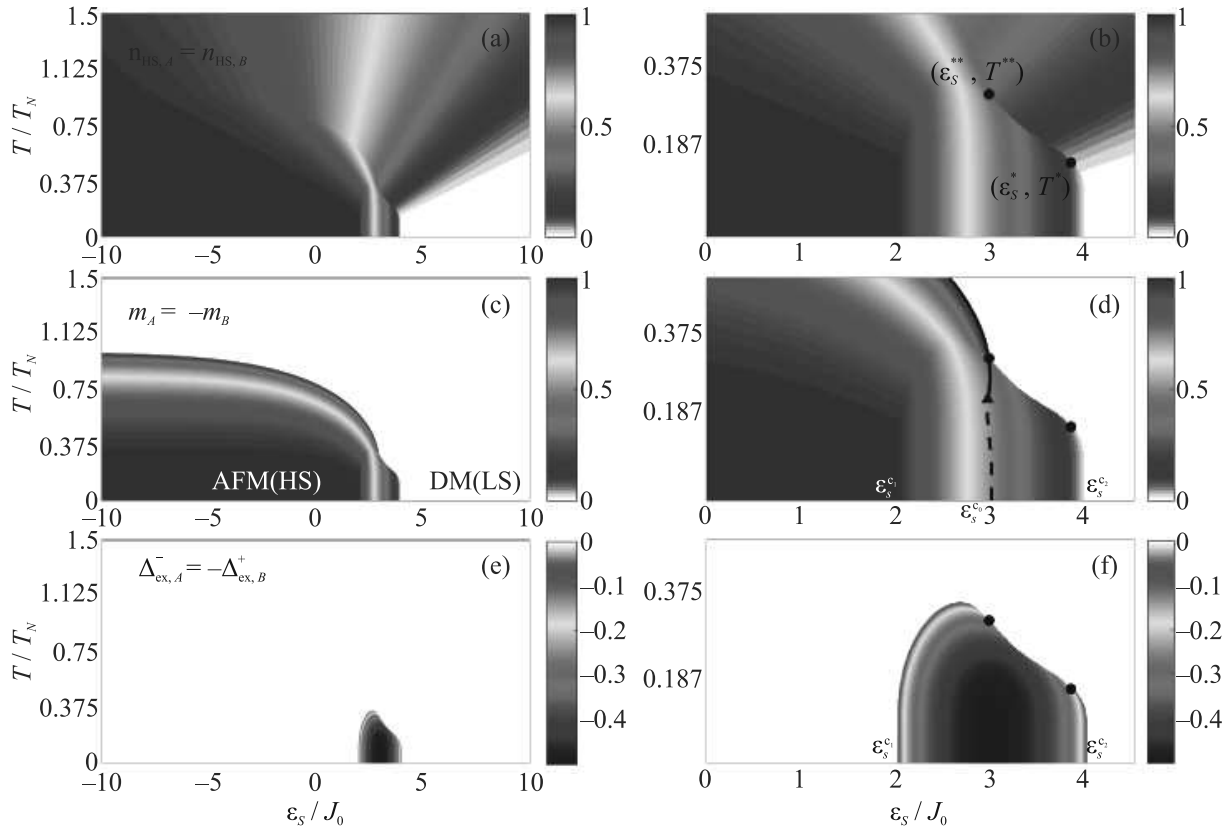


Рис. 1. (Цветной онлайн) Рассчитанные фазовые диаграммы заселенности HS-состояния  $n_{HS}$  (a), (b), намагниченности  $m$  (c), (d) и компонент экситонного параметра порядка  $\Delta_{ex}^{\sigma}$  (e), (f) для двух подрешеток  $A$  и  $B$ . Справа приведены результаты в увеличенном масштабе вблизи кроссовера. Расчеты выполнены для следующих значений параметров:  $z = 4$ ,  $J = J_0$ ,  $\tilde{J} = 0.5J_0$ ,  $J''_{ex} = 0.5J_0$

способствует антиферромагнитному упорядочению и появлению намагниченности в области  $\varepsilon_S^{c_0} < \varepsilon_S < \varepsilon_S^{c_2}$ , где при  $J''_{ex} = 0$  дальнего магнитного порядка не было. На рисунке 1d черной сплошной и пунктирной линиями показаны линии фазовых переходов 2-го и 1-го рода соответственно при  $J''_{ex} = 0$ . В этом случае основное AFM(HS)-состояние сохраняется вплоть до  $\varepsilon_S = \varepsilon_S^{c_0} \approx 3J_0 < \varepsilon_S^{c_2}$ , и на фазовой диаграмме есть только одна трикритическая точка, отмеченная треугольником (рис. 1d).

Из-за образования экситонного конденсата (рис. 1e, f) появляется отличная от нуля заселенность HS-состояния (рис. 1a, b) и намагниченность (рис. 1c, d) при  $\varepsilon_S^{c_0} < \varepsilon_S < \varepsilon_S^{c_2}$ . Физически это довольно понятно из структуры экситонного параметра порядка. При  $J > 0$  и  $J''_{ex} > 0$  его структура такова, что если  $\Delta_A^- \neq 0$ , то  $\Delta_A^+ = 0$ , при этом  $\Delta_A^- = -\Delta_B^+$  и  $\Delta_B^- = 0$ . И наоборот, если  $\Delta_A^+ \neq 0$ , то  $\Delta_A^- = 0$ , при этом  $\Delta_B^- = -\Delta_A^+$  и  $\Delta_B^+ = 0$ .  $\Delta_A^0$  и  $\Delta_B^0$  равны нулю. Отличие от нуля соответствующих средних  $\Delta^{+/-}$  на разных подрешетках делает возможным

сосуществование экситонного конденсата с антиферромагнетизмом и способствует формированию последнего.

В связи с вышеизложенным представляет интерес случай  $J = 0$ , но  $J''_{ex} \neq 0$ . На рисунке 2 представлены рассчитанные фазовые диаграммы компонентов экситонного параметра порядка  $\Delta_{ex}^{\sigma}$ , заселенности HS-состояния  $n_{HS}$  и намагниченности  $m$ , для двух подрешеток  $A$  и  $B$  в координатах температура  $T$  – спиновая щель  $\varepsilon_S$  (кристаллическое поле). Расчеты были выполнены без учета межатомного обменного взаимодействия при  $J = 0$ , но для удобства сравнения со случаем, рассмотренным выше, когда  $J \neq 0$ , здесь и ниже температура и спиновая щель также приведены в единицах  $T_N$  и обменного интеграла  $J_0$ . Видно, что  $n_{HS,A} = n_{HS,B}$  (рис. 2d);  $m_A = -m_B$  – в системе реализуется дальний антиферромагнитный порядок (рис. 2e) даже при  $J = 0$ , поскольку  $\Delta_{ex,A(B)}^+ \neq \Delta_{ex,A(B)}^-$  (рис. 2a, b), при этом  $\Delta_{ex,A}^0 = \Delta_{ex,B}^0$  (рис. 2c), а  $\Delta_{ex,A}^{+/-}$  и  $\Delta_{ex,B}^{+/-}$  отличаются знаком и равны по модулю (рис. 2a, b).

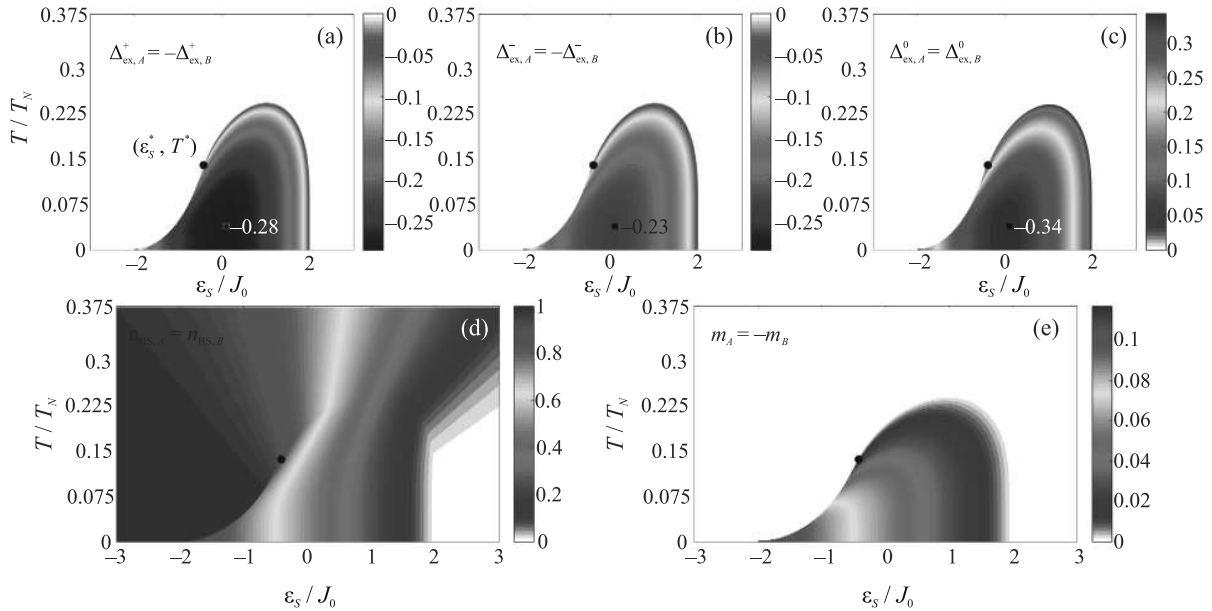


Рис. 2. (Цветной онлайн) Фазовые диаграммы компонент экситонного параметра порядка  $\Delta_{ex}^\sigma$  (a)–(c), заселенности HS-состояния  $n_{HS}$  (d) и намагниченности  $m$  (e) для двух подрешеток  $A$  и  $B$ . В точке  $(\varepsilon_S/J_0 = 0.1, T/T_N = 0.04)$ , отмеченной черным квадратом, в качестве примера указаны значения  $\Delta_{ex,A}^\sigma$ . Расчеты выполнены для следующего набора параметров:  $z = 4, J = \tilde{J} = 0, J''_{ex} = 0.5J_0$

На фазовых диаграммах (рис. 2) хорошо видно существование особой трикритической точки ( $T^*$  и  $\varepsilon_S^*$ ), в которой линия фазовых переходов 2-го рода непрерывно переходит в линию фазовых переходов 1-го рода. В области  $\varepsilon_S > \varepsilon_S^*$  (рис. 2e) с ростом температуры система испытывает фазовый переход 2-го рода из AFM(HS) в парамагнитное состояние и 1-го рода, если  $\varepsilon_S < \varepsilon_S^*$ . Асимметрия всех фазовых диаграмм (рис. 2) относительно смены знака спиновой щели связана с разной кратностью вырождения HS- и LS-состояний.

В заключение данного раздела нам бы хотелось обсудить полученные результаты в сравнении с результатами работы Волкова и Копаева [4] о “экситонном” ферромагнетизме. В работе [4], кроме электрон-электронного, рассматривается электрон-фононное взаимодействие и вкратце ситуацию можно описать следующим образом. Магнитная структура типа волны спиновой плотности (ВСП) реализуется, как известно, в металлах, топология много-связной поверхности Ферми которых характеризуется наличием электронного и дырочного участков, совмещающихся при параллельном переносе на некоторый вектор  $\mathbf{q}$ . ВСП возникает из-за триплетного спаривания одночастичных возбуждений совмещающихся электронного и дырочного участков поверхности Ферми. Если ВСП накладывается на уже имеющуюся в системе волну зарядовой плотности (ВЗП),

обусловленную синглетным спариванием электронных и дырочных состояний, картина усложняется. Сосуществующие однофазные соизмеримые ВСП и ВЗП индуцируют дополнительное магнитное расщепление спектра одночастичных возбуждений, в результате чего появляется магнитный момент единицы объема кристалла при легировании – так называемый “экситонный ферромагнетизм”. В настоящей работе по аналогии с [4] мы можем говорить о “экситонном антиферромагнетизме”, в котором образование экситонной фазы способствует появлению дальнего антиферромагнитного порядка.

**4. Роль электрон-фононного взаимодействия.** Как видно, структура и симметрия экситонного параметра порядка определяют возможность сосуществования экситонного конденсата и антиферромагнетизма и возникновение последнего (рис. 1, 2). В отсутствие межатомного обменного взаимодействия намагниченность является несобственным параметром порядка, поскольку является следствием экситонного упорядочения (рис. 2). Электрон-фононное взаимодействие является одним из факторов, способных изменить структуру (симметрию) экситонного параметра порядка. С учетом электрон-фононного взаимодействия вместо (18) будем иметь

$$\hat{H}|\psi_k\rangle = E_k|\psi_k\rangle, \quad (19)$$

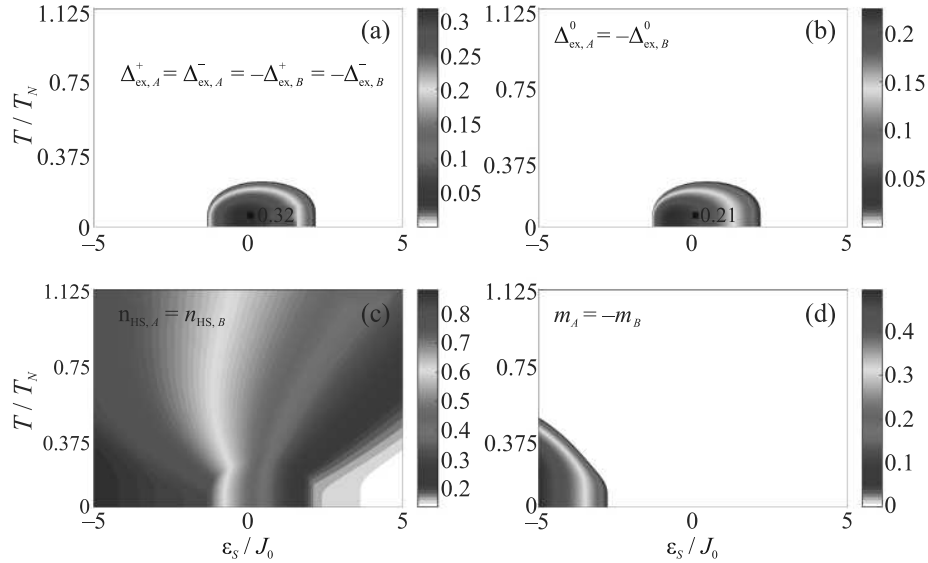


Рис. 3. (Цветной онлайн) Фазовые диаграммы компонент экситонного параметра порядка  $\Delta_{ex}^\sigma$  (a), (b), заселенности HS-состояния  $n_{HS}$  (c) и намагниченности  $m$  (d) для двух подрешеток  $A$  и  $B$  при учете недиагонального электрон-фононного взаимодействия. В точке  $(\varepsilon_S/J_0 = 0.08, T/T_N = 0.06)$ , отмеченной черным квадратом, в качестве примера указаны значения  $\Delta_{ex,A}^+ = 0.32$  (a) и  $\Delta_{ex,A}^0 = 0.21$  (b). Расчеты выполнены для следующего набора параметров:  $z = 4, J = J_0, \tilde{J} = 0.0, J''_{ex} = 0.6J_0, g_1 = 0.0, g_2 = 5.8J_0$

где  $|\psi_k\rangle$  – собственные состояния гамильтониана  $\hat{H} = \hat{H}_{eff}^{MF} + \hat{H}_{1ph} + \hat{H}_{2ph}$ .

$$\begin{aligned} \hat{H}_{1ph} = & \omega_{0(1)} \sum_i \left( a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2} \right) + \\ & + g_1 \sum_i \left( a_i + a_i^\dagger \right) \left( X_i^{s,s} - \sum_{\sigma=-1}^{+1} X_i^{\sigma,\sigma} \right) \end{aligned} \quad (20)$$

содержит диагональное электрон-фононное взаимодействие, а

$$\begin{aligned} \hat{H}_{2ph} = & \omega_{0(2)} \sum_i \sum_{\sigma=-1}^{+1} \left( b_{i,\sigma}^\dagger b_{i,\sigma} + \frac{1}{2} \right) + \\ & + g_2 \sum_i \sum_{\sigma=-1}^{+1} \left( b_{i,\sigma} + b_{i,\sigma}^\dagger \right) \left( X_i^{s,\sigma} + X_i^{\sigma,s} \right) \end{aligned} \quad (21)$$

описывает недиагональные электрон-фононные процессы перехода из синглета  $|s\rangle$  в триплет  $|\sigma\rangle$  и обратно. Здесь  $g_{1(2)}$  – константы электрон-фононного взаимодействия,  $\omega_{0(1,2)}$  – частоты фононов “a” и “b” типа.

Наличие диагонального электрон-фононного взаимодействия (20) не приводит к качественным изменениям. Симметрия экситонного параметра порядка остается прежней и не меняется, но область экситонного конденсата уменьшается с ростом  $g_1$  – диагональное электрон-фононное взаимодействие подавляет фазу экситонного конденсата. Наоборот, при

наличии недиагонального электрон-фононного взаимодействия (21), экситонный параметр порядка меняет свою симметрию. В этом случае  $\Delta_A^\sigma = -\Delta_B^\sigma$ ,  $\Delta_{A(B)}^+ = \Delta_{A(B)}^-$  и  $|\Delta_{A(B)}^{+/-}| \neq |\Delta_{A(B)}^0|$ , что делает невозможным сосуществование антиферромагнетизма и экситонного конденсата. На рисунке 3 представлены результаты расчета фазовых диаграмм при наличии только недиагонального электрон-фононного взаимодействия (21). Видно, что область антиферромагнетизма уменьшилась (рис. 3d) и разнится с экситонной фазой (рис. 3a, b). С ростом  $g_2$  область экситонного конденсата увеличивается, а антиферромагнетизм подавляется.

**5. Обсуждение и выводы.** Используя выражение (1), можно выделить два случая. В первом случае (слабо коррелированный), когда  $\hat{H}_{Coulomb} \ll \hat{H}_\Delta + \hat{H}_t$ , мы имеем двухзонный полупроводник или полуметалл (в зависимости от соотношения между  $\Delta$  и  $t$ ), в котором возможно формирование экситонного конденсата по сценарию БЭК (конденсация Бозе-Эйнштейна) или БКШ. Во втором случае (сильно коррелированный), когда энергия кулоновского взаимодействия электронов становится сопоставимой с энергией кристаллического поля  $\hat{H}_{Coulomb} \sim \hat{H}_\Delta$  и больше их кинетической энергии  $\hat{H}_{Coulomb} > \hat{H}_t$ , появляется возможность для спинового кроссовера и формирования локализованных магнитных экситонов. В настоящей работе в рамках

двухзонной модели Хаббарда мы показали, что имеет место конденсация таких экситонов вблизи спинового кроссовера, которая, в свою очередь, приводит к возникновению антиферромагнитного упорядочения даже в отсутствие межатомного обменного взаимодействия. Обнаружено появление антиферромагнетизма, обусловленного бозе-конденсатом экситонов. Следует отметить, что в модели экситонного диэлектрика при слабом межэлектронном взаимодействии формирование экситонного конденсата также может приводить к появлению магнитного порядка в отсутствие обменного взаимодействия [4].

Для систем со спиновым кроссовером, у которых основным является LS-состояние, а HS-состояние отделено от основного состояния спиновой щелью  $\varepsilon_S$ , особый интерес представляют исследования в сильных магнитных полях [27–31], поскольку наличие последнего приводит при  $B = B_c$  к пересечению термов (магнитоиндуцированному спиновому кроссоверу). В качестве только одного примера приведем недавно обнаруженный в сильном магнитном поле новый магнитный переход в  $\text{LaCoO}_3$  [28], который может быть связан с конденсацией магнитных экситонов [12, 13]. Рассматриваемая в настоящей работе модель и полученные результаты могут быть использованы для описания необычного поведения  $\text{LaCoO}_3$  [28] и  $(\text{Pr}_{1-y}\text{Y}_y)_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{CoO}_3$  [32] в сильных магнитных полях.

Исследование выполнено за счет средств гранта Российского научного фонда # 22-22-20007 Красноярского краевого фонда науки.

1. N. F. Mott, *The transition to the metallic state*, Philos. Mag. **6**(62), 287 (1961).
2. R. S. Knox, *The Theory of Excitons in Solid State Physics*, ed. by F. Seitz and D. Turnbull, Academic Press, N.Y. (1963).
3. L. V. Keldysh and Y. V. Kopaev, Soviet Phys. Solid State **6**(9), p. 2219 (1965).
4. B. A. Volkov, Y. V. Kopaev, and A. I. Rusinov, Sov. Phys. JETP **41**, 952 (1975).
5. J. Kuneš, J. Phys. Condens. Matter **27**, 333201 (2015).
6. J. Nasu, T. Watanabe, M. Naka, and S. Ishihara, Phys. Rev. B **93**, 205136 (2016).
7. P. Werner and A. J. Millis, Phys. Rev. Lett. **99**, 126405 (2007).
8. R. Suzuki, T. Watanabe, and S. Ishihara, Phys. Rev. B **80**, 054410 (2009).

9. L. Balents, Phys. Rev. B **62**, 2346 (2000).
10. T. Kaneko and Y. Ohta, Phys. Rev. B **90**, 245144 (2014).
11. J. Kuneš and P. Augustinský, Phys. Rev. B **89**, 115134 (2014).
12. A. Sotnikov and J. Kuneš, Sci. Rep. **6**, 30510 (2016).
13. T. Tatsuno, E. Mizoguchi, J. Nasu, M. Naka, and S. Ishihara, J. Phys. Soc. Jpn. **85**(8), 083706 (2016).
14. G. Khaliullin, Phys. Rev. Lett. **111**, 197201 (2013).
15. C. A. Belvin, E. Baldini, I. O. Ozel, D. Mao, H. C. Po, C. J. Allington, S. Son, B. H. Kim, J. Kim, I. Hwang, J. H. Kim, J.-G. Park, T. Senthil, and N. Gedik, Nat. Commun. **12**(1), 4837 (2021).
16. K. Kitagawa and H. Matsueda, J. Phys. Soc. Jpn. **91**(10), 104705 (2022).
17. T. Feldmaier, P. Strobel, M. Schmid, P. Hansmann, and M. Daghofer, Phys. Rev. Res. **2**, 033201 (2020).
18. J. Kanamori, Prog. Theor. Phys. **30**(3), 275 (1963).
19. J. Hubbard, Proc. R. Soc. A **277**(1369), 237 (1964).
20. R. O. Zaitsev, Sov. Phys. JETP **43**, 574 (1976).
21. K. A. Chao, J. Spalek, and A. M. Oles, J. Phys. C **10**(10), L271 (1977).
22. V. A. Gavrichkov, S. I. Polukeev, and S. G. Ovchinnikov, Phys. Rev. B **95**, 144424 (2017).
23. V. V. Val'kov and S. G. Ovchinnikov, Theor. Math. Phys. **50**(3), 466 (1982).
24. S. V. Vonsovskii and M. S. Svirskii, Sov. Phys. JETP **20**(5), 914 (1965).
25. V. M. Agranovich and B. S. Toshich, JETP **26**, 104 (1968).
26. M. J. R. Hoch, S. Nellutla, J. van Tol, E. S. Choi, J. Lu, H. Zheng, and J. F. Mitchell, Phys. Rev. B **79**, 214421 (2009).
27. K. Sato, A. Matsuo, K. Kindo, Y. Kobayashi, and K. Asai, J. Phys. Soc. Jpn. **78**(9), 093702 (2009).
28. A. Ikeda, T. Nomura, Y. H. Matsuda, A. Matsuo, K. Kindo, and K. Sato, Phys. Rev. B **93**, 220401(R) (2016).
29. V. Platonov, Y. B. Kudasov, M. Monakhov, and O. Tatsenko, Phys. Solid State **54**(2), 279 (2012).
30. M. M. Altarawneh, G.-W. Chern, N. Harrison, C. D. Batista, A. Uchida, M. Jaime, D. G. Rickel, S. A. Crooker, C. H. Mielke, J. B. Betts, J. F. Mitchell, and M. J. R. Hoch, Phys. Rev. Lett. **109**, 037201 (2012).
31. M. Rotter, Z.-S. Wang, A. T. Boothroyd, D. Prabhakaran, A. Tanaka, and M. Doerr, Sci. Rep. **4**, 7003 (2014).
32. A. Ikeda, S. Lee, T. T. Terashima, Y. H. Matsuda, M. Tokunaga, and T. Naito, Phys. Rev. B **94**, 115129 (2016).

# Оператор Рунге–Ленца в импульсном пространстве

С. П. Ефимов<sup>1)</sup>

Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана, 105005 Москва, Россия

Поступила в редакцию 3 марта 2023 г.

После переработки 26 марта 2023 г.

Принята к публикации 30 марта 2023 г.

Рассмотрена квантовая фундаментальная задача Кулона в импульсном пространстве. Вместо интегрального уравнения Фока найдено дифференциальное уравнение, связанное с группой  $SO(4)$ . В координатном пространстве это сумма квадратов операторов углового момента и нормированного вектора Рунге–Ленца. В импульсном пространстве такой подход не известен и оператор Рунге–Ленца не используется. Найденная форма оператора Рунге–Ленца проще, чем в координатном пространстве, что позволяет эффективно рассматривать задачу Кулона в импульсном пространстве. Найдена связь с оператором инфинитезимального вращения трехмерной сферы Фока.

DOI: 10.31857/S1234567823090124, EDN: bpsomb

**1. Введение.** Квантовая задача Кулона, позволяющая рассчитывать спектр системы из двух противоположных зарядов, является до сих пор фундаментальной в квантовой теории [1–4]. С ней связаны имена основателей физики XX в. Н. Бора, А. Зоммерфельда, В. Паули, Э. Шредингера, В. Фока. С нее начинается введение в теорию атомных спектров, и она прекрасно изучена методами теории специальных функций. Благодаря своей простоте и заложенной в ней симметрии – группе вращений 4-х мерного пространства  $SO(4)$ , задача Кулона является исключительно полезным и тонким инструментом теоретической физики для построения различных концепций [5–7].

Переход в импульсное пространство в теоретической физике, в частности, в квантовой электродинамике, исключительно эффективен, поскольку локальные дифференциальные операторы превращаются в полиномы и преобразования сводятся к алгебраическим. Задача Кулона здесь занимает отдельную нишу. При переходе в импульсное пространство уравнение Шредингера (УШ) становится интегральным. Фок применил к импульсному  $3d$ -пространству стереографическую проекцию, сворачивая его в  $3d$ -сферу [8–10].

Интегральное уравнение переходит в уравнение для сферических функций на сфере в  $4d$ -пространстве, которое условно интерпретируется как свободное движение квантовой частицы на  $3d$ -сфере.

Напомним предысторию достижения Фока. Два

классических векторных интеграла – угловой момент и вектор Лапласа–Рунге–Ленца в квантовой механике соответствуют векторным операторам, которые коммутируют с оператором энергии. Анализ их коммутаторов, проведенный в [11], показывает, что они порождают алгебру Ли (линейное пространство с операцией коммутирования), совпадающую с алгеброй Ли малых (инфинитезимальных) операторов поворотов 4-х мерного пространства [1, 3].

Для физиков это соответствие означает, что существует преобразование переменных и операторов, которое переводит исходную квантовую задачу Кулона в некоторое состояние частицы на трехмерной  $3d$ -сфере, вложенной в четырехмерное  $4d$ -пространство. Оператор энергии при этом будет инвариантен при вращениях  $3d$ -сферы и возникает, естественно, векторный оператор рождения на трехмерной сфере, разработанный для сферы двумерной [13].

В работе [14] УШ трансформируется так, что все радиусы орбит сводятся к единице. Это означает, что задача сводится к квантованию величины заряда  $Z = n$ . УШ возводится в квадрат и возникающий оператор перестает быть эрмитовым, не теряя нужных свойств. После этого можно применить переход в импульсное пространство со свойством локальности. Возникает дифференциальное уравнение для собственных функций в импульсном пространстве. В этой работе найден физический смысл уравнения, его решения, и с помощью него дифференциальный оператор Рунге–Ленца простой формы в импульсном пространстве. Применение его в теоретической физике значительно упрощается. Показана

<sup>1)</sup>e-mail: serg.efimo2012@yandex.ru

связь с инфинитезимальным оператором на  $3d$ -сфере Фока.

Таким образом, квантовая задача Кулона занимает нужную позицию при переходе в импульсное пространство, что весьма полезно для теорий, рассматривающих кулоновское взаимодействие вместе с теорией возмущений.

**2. Теория Фока.** УШ для собственных функций связанных состояний при использовании атомных единиц, когда единица энергии есть  $\frac{Z^2 m e^2}{\hbar^2}$ , а единица длины – радиус Бора  $a_B = \frac{\hbar^2}{Z m e^2}$ , имеет вид

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta - \frac{1}{2}\right) \Psi_{nl} = -\frac{1}{2n^2} \Psi_{nl}. \quad (1)$$

Удобно далее все орбиты радиусов  $na_B$  привести к одному радиусу [1], т.е. сделать замену радиуса вектора (для каждой собственной функции):  $\mathbf{x}' = \frac{\mathbf{x}}{n}$ . Уравнение (1) приобретает простую математическую форму:

$$(-\Delta + 1)\Psi_{nl} = \frac{2n}{r} \Psi_{nl}, \quad (2)$$

где опять применены обозначения: для вектора  $\mathbf{x}$ , а для его модуля  $r$ . Собственные функции в импульсном представлении будут тогда иметь “растянутый” аргумент:  $\mathbf{p}' = n\mathbf{p}$ .

УШ (2) при переходе к импульсному представлению ( $\hbar = 1$ ):

$$\Psi_{nl}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int a_{nl}(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\mathbf{x})} d^3\mathbf{p}, \quad (3)$$

содержит свертку по импульсам. Поскольку потенциал  $1/r$  переходит в  $4\pi/\mathbf{p}^2$ , УШ в импульсном пространстве нелокально:

$$(\mathbf{p}^2 + 1)a_{nl}(\mathbf{p}) - \frac{2n}{2\pi^2} \int \frac{a_{nl}(\mathbf{p}') d^3\mathbf{p}'}{|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2} = 0. \quad (4)$$

Фок применил к этому уравнению стереографическую проекцию [11], которая сгибает трехмерное плоское пространство в трехмерную сферу. Четыре координаты на сфере связаны с импульсами следующим образом<sup>2)</sup>:

$$\boldsymbol{\xi} = \frac{2\mathbf{p}}{(1 + \mathbf{p}^2)}, \quad \xi_0 = \frac{(\mathbf{p}^2 - 1)}{(\mathbf{p}^2 + 1)}, \quad \boldsymbol{\xi}^2 + \xi_0^2 = 1. \quad (5)$$

В новых переменных, с учетом множителя, выбранным Фоком для функции  $a_{nl}(\mathbf{p})$ , собственная функция равна:

$$b_{nl}(\boldsymbol{\xi}, \xi_0) = (\mathbf{p}^2 + 1)^2 a_{nl}(\mathbf{p}). \quad (6)$$

<sup>2)</sup>В монографии [3] изменен знак  $\zeta$ .

Существенно, что проекция является конформным преобразованием. Углы между пересекающимися кривыми сохраняются. (По этой причине проекцию изобрели для морских карт.) Метрика на сфере в координатах пространства импульсов ( $3d$ -плоскости  $\mathbf{p}$ ) равна:

$$\frac{4}{(\mathbf{p}^2 + 1)^2} (d\mathbf{p}^2). \quad (7)$$

Отсюда коэффициент сжатия элементов пространства  $\mathbf{p}$  равен  $(1 + \mathbf{p}^2)/2$ . Элемент объема в формуле (10) заменяем через элемент трехмерной поверхности:

$$d^3\mathbf{p} = \frac{1}{8} (1 + \mathbf{p}^2)^3 dS_3. \quad (8)$$

Ядро интеграла удачно для физики (и не очевидно для математики) преобразуется следующим образом:

$$\frac{1}{|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2} = \frac{2}{(\mathbf{p}^2 + 1)} \frac{1}{[(\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\xi}')^2 + (\xi_0 - \xi_0')^2]} \frac{2}{(\mathbf{p}'^2 + 1)}, \quad (9)$$

что не вытекает из конформности.

Теперь подставляем соотношения (6), (8) и (9) в интегральное уравнение (4). Получаем:

$$b_{nl}(\boldsymbol{\xi}, \xi_0) - \frac{n}{2\pi^2} \int \frac{b_{nl}(\boldsymbol{\xi}', \xi_0') dS_3'}{[(\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\xi}')^2 + (\xi_0 - \xi_0')^2]} = 0. \quad (10)$$

Это уравнение, как заметил Фок, для сферических функций на трехмерной сфере [15].

Для физики необходимо рассматривать решения, которые пропорциональны (обычным) двумерным сферическим функциям:

$$Y_{n,l}(\theta, \phi) P_{n-1-l}^{l+1}(\boldsymbol{\xi}, \zeta), \quad (11)$$

где второй множитель есть полином Гегенбауэра [15]. Аргументы полинома Гегенбауэра есть координаты на сфере Фока, связанные с импульсами по формулам (5). Таким образом, Фок впервые нашел общую формулу для собственных функций в импульсном пространстве.

### 3. Дифференциальная форма УШ в импульсном пространстве.

*3.1. Вывод уравнения.* Следуя работе [13], исходим из уравнения (2), когда радиус орбиты (при умножении аргумента на  $n$ ) сведен к единице. Умножим (2) на модуль  $r$  и возведем обе части в квадрат:

$$r(-\Delta + 1)r(-\Delta + 1)\Psi_{nl} = 4n^2\Psi_{nl}. \quad (12)$$

Переставляя операторы, имеем:

$$[r^2(\Delta - 1)^2 + 2(\hat{l}_r + 1)(\Delta - 1)]\Psi_{nl} = 4n^2\Psi_{nl}, \quad (13)$$

где оператор “степени”  $\hat{l}_n = (\mathbf{r}\nabla)$ . В соответствии с теоремой Эйлера, которая справедлива для всех однородных функций (не только для полиномов, например для множителя  $1/r$  и его степеней), оператор умножает однородный полином на его степень.

Переходим к новой функции

$$\Phi_{nl} = (\Delta - 1)^2 \Psi_{nl},$$

что соответствует умножению спектра на  $(p^2 + 1)^2$  (см. в методе Фока (6)). Для этого применим к уравнению (13) оператор  $(\Delta - 1)^2$  слева и переставим операторы  $\hat{l}_r$  и  $\Delta$  местами. Получаем уравнение для функции  $\Phi_{nl}(\mathbf{x})$ :

$$[(\Delta - 1)^2 r^2 + 2(\Delta - 1)(\hat{l}_r + 3)]\Phi_{nl} = 4(n^2 - 1)\Phi_{nl}.$$

Теперь можно перейти к спектрам  $a_{nl}(\mathbf{p})$  и  $b_{nl}(\mathbf{p})$ , заменяя  $\nabla_r$  на  $i\mathbf{p}$  и  $\mathbf{x}$  на  $i\nabla_p$ :

$$\left[ -\frac{(p^2 + 1)^4}{4}\Delta_p + \frac{(p^2 + 1)}{2}\hat{l}_p \right] b_{nl} = (n^2 - 1)b_{nl},$$

$$b_{nl}(\mathbf{p}) = (p^2 + 1)^2 a_{nl}(\mathbf{p}), \quad (14)$$

где  $\hat{l}_p = (\mathbf{p}\nabla_p)$  – импульсный оператор степени. Вместо интегрального уравнения Фока получаем задачу, не сложнее УШ в координатном пространстве, поскольку оно напоминает УШ с суммой двух потенциалов. Теперь необходимо выяснить его групповой смысл.

**3.2. Решение уравнения.** Решение уравнения ищем в виде произведения

$$b_{nl}(\mathbf{p}) = Y_l(\mathbf{p}) \frac{1}{(p^2 + 1)^l} P_k \left( \frac{1}{(p^2 + 1)} \right), \quad (15)$$

где  $Y_l(\mathbf{p})$  – шаровая функция (т.е. однородный полином), множитель  $P_k(u)$  – полином степени  $k$ . Используем при подстановке полезные соотношения для шаровых функций:

$$\Delta Y_l(\mathbf{p}) = 0, \quad Y_l(c\mathbf{p}) = c^l Y_l(\mathbf{p}), \quad (\mathbf{p}\nabla) Y_l(\mathbf{p}) = l Y_l(\mathbf{p}). \quad (16)$$

Для полинома  $P_k(u)$  уравнение (16) дает функцию Гаусса<sup>3)</sup>:

$$F(\alpha, \beta, \gamma, u) = 1 + \frac{\alpha\beta}{\gamma} \frac{u}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{\gamma(\gamma+1)} \frac{u^2}{2!} + \dots,$$

где параметры следующие:

$$\alpha = -k, \quad \beta = 2l + k + 2, \quad \gamma = l + \frac{3}{2},$$

<sup>3)</sup>Гипергеометрическая функция  ${}_2F_1$ .

$$k = n - l - 1, \quad u = \frac{1}{(p^2 + 1)}. \quad (17)$$

Напомним, что переход к реальному спектру требует умножение аргумента  $\mathbf{p}$  на  $n$ .

Найденная система решений (15) в точности соответствует образам Фурье решений УШ. Это следует хотя бы из того, что угловые зависимости их совпадают ( $l$  в координатном пространстве переходит в  $l$  в импульсном пространстве, как и сам оператор углового момента). Кроме того, как следует из теории специальных функций [15], функция Гаусса при замене координат (5) переходит в точности в полином Гегенбауера, т.е. в решение (11), найденное Фоком.

Примеры.

а)  $n = 2, l = 0, k = 1$  (изотропное состояние). Импульс удвоим, возвращаясь к радиусу 2.

$$a_{20}(\mathbf{p}) = (\text{const}) \frac{1}{(1 + 4p^2)^2} \left( 1 - \frac{2}{(1 + 4p^2)} \right).$$

Вывод этой формулы с помощью преобразования Ханкеля уже достаточно громоздок.

б)  $n = l + 1, k = 0$  ( $l$  максимально).

$$\Psi_{n(n-1)}(\mathbf{x}) = Y_{(n-1)}(\mathbf{x}) e^{-r},$$

$$a_{nl}(\mathbf{p}) = \frac{Y_l(\mathbf{p})}{(1 + p^2)^{(2+l)}}.$$

Возвращаясь к физическому аргументу  $n\mathbf{p}$  и используя однородность полинома  $Y_l(\mathbf{p})$ , получаем:

$$a_{nl}(\mathbf{p}) = (\text{const}) \frac{Y_{(n-1)}(\mathbf{p})}{(1 + n^2 p^2)^{(n+1)}}.$$

**4. Оператор Рунге–Ленца в импульсном пространстве.** В безразмерных координатах оператор Рунге–Ленца  $\hat{R}_x$  есть [1]:

$$\hat{R}_r = \frac{\mathbf{r}}{r} - \frac{1}{2}([\hat{\mathbf{p}}l] - [l\hat{\mathbf{p}}]). \quad (18)$$

При переходе к радиусу, равному единице, следует умножить оператор (18) на  $n$ , чтобы правила коммутации соответствовали группе  $SO(4)$  [1, 11]. После раскрытия скобок векторных произведений, получаем нормированный оператор,

$$\hat{A}_r = \frac{n\mathbf{r}}{r} - \frac{1}{2}([\hat{\mathbf{p}}l] - [l\hat{\mathbf{p}}]) = \frac{n\mathbf{r}}{r} + \mathbf{r}\Delta - (\hat{l}_r + 1)\nabla, \quad (19)$$

где  $\hat{l}_r = (\mathbf{r}\nabla)$ .

Переход в импульсное пространство дает интегральный оператор, поскольку входит потенциал  $1/r$ . По этой причине оператор Рунге–Ленца в импульсном пространстве исторически не фигурирует [1, 3].

Используем прием, который позволил в [13] получить дифференциальное уравнение. Подставим в (19) значение  $\frac{\mathbf{r}}{r}$  из уравнения (2). Получаем выражение

$$\hat{A}_{\mathbf{r}} = \mathbf{r} \frac{(\Delta + 1)}{2} - (\hat{l}_{\mathbf{r}} + 1)\nabla, \quad (20)$$

к которому можно применить преобразование Фурье. Заменяя операторы:

$$\mathbf{r} \rightarrow i\nabla_{\mathbf{p}}, \quad \nabla_{\mathbf{r}} \rightarrow i\mathbf{p}, \quad \hat{l}_{\mathbf{x}} \rightarrow -(\hat{l}_{\mathbf{p}} + 3), \quad (21)$$

переходим к (модифицированному) оператору Рунге–Ленца в импульсном пространстве:

$$\hat{A}_{\mathbf{p}} = i(\hat{l}_{\mathbf{p}} + 1)\mathbf{p} - \frac{(p^2 - 1)}{2}i\nabla_{\mathbf{p}}, \quad (22)$$

действующий на функции  $a_{nl}(\mathbf{p})$ . Для сравнения с теорией Фока, необходимо перейти к пространству функций  $b_{nl}(\mathbf{p})$ :

$$\begin{aligned} \hat{A}_{\mathbf{p}} &= (p^2 + 1)^2 i \left[ (\hat{l}_{\mathbf{p}} + 1)\mathbf{p} - \frac{(p^2 - 1)}{2} \right] \frac{1}{(p^2 + 1)} = \\ &= i\mathbf{p}\hat{l}_{\mathbf{p}} - \frac{(p^2 - 1)}{2}i\nabla_{\mathbf{p}}. \end{aligned} \quad (23)$$

**5. Свойства оператора Рунге–Ленца.** Оператор Рунге–Ленца оказался проще, чем в координатном пространстве:

$$\hat{A}_{\mathbf{p}} = i\mathbf{p}\hat{l}_{\mathbf{p}} - \frac{(p^2 - 1)}{2}i\nabla_{\mathbf{p}}. \quad (24)$$

Его свойства в импульсном пространстве сохраняются. Свойства коммутации:

$$\{L_i, \hat{A}_{\mathbf{p}k}\} = ie_{ikl}\hat{A}_{\mathbf{p}l}, \quad \{\hat{A}_{\mathbf{p}i}, \hat{A}_{\mathbf{p}k}\} = ie_{ikl}L_l. \quad (25)$$

Свойства ортогональности:

$$\hat{A}_{\mathbf{p}}\hat{L} = \hat{L}\hat{A}_{\mathbf{p}} = 0.$$

Наконец, наиболее важное для группы SO(4) (сумма квадратов):

$$\hat{L}^2 + \hat{A}_{\mathbf{p}}^2 = -\frac{(p^2 + 1)^4}{4}\Delta_{\mathbf{p}} + \frac{(p^2 + 1)}{2}\hat{l}_{\mathbf{p}}. \quad (26)$$

Сравнивая с оператором из уравнения (14), можно сделать вывод, что собственное значение суммы квадратов операторов равно  $(n^2 - 1)$ , также как и в координатном пространстве [1].

Проверим, какому оператору на сфере Фока соответствует найденный оператор. В соответствии с (5), на сфере Фока произвольная функция  $f(\boldsymbol{\xi}, \zeta)$  при переходе в плоское импульсное пространство превращается в функцию

$$f\left(\frac{2\mathbf{p}}{(p^2 + 1)}, \frac{(p^2 - 1)}{(p^2 + 1)}\right), \quad (27)$$

у которой сумма квадратов аргументов равна единице. Применим к ней оператор Рунге–Ленца (24).

Последовательное дифференцирование аргументов дает:

$$\begin{aligned} \left(\hat{l}_{\mathbf{p}} \frac{2\mathbf{p}}{(p^2 + 1)}\right) \nabla_{\boldsymbol{\xi}} &= \frac{2\mathbf{p}(1 - p^2)}{(p^2 + 1)^2} \nabla_{\boldsymbol{\xi}} = (-\zeta)(\boldsymbol{\xi} \nabla_{\boldsymbol{\xi}}), \\ \left(\hat{l}_{\mathbf{p}} \frac{(p^2 - 1)}{(p^2 + 1)}\right) \frac{\partial}{\partial \zeta} &= \frac{4p^2}{(p^2 + 1)^2} \frac{\partial}{\partial \zeta} = \frac{2}{(p^2 + 1)}(1 + \zeta) \frac{\partial}{\partial \zeta}, \\ \nabla_{\mathbf{p}} \left(\frac{2\mathbf{p}}{(p^2 + 1)} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\xi}}\right) &= \frac{2}{(p^2 + 1)} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\xi}} - \frac{4\mathbf{p}}{(p^2 + 1)^2} \left(\mathbf{p} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\xi}}\right), \\ \left(\nabla_{\mathbf{p}} \frac{(p^2 - 1)}{(p^2 + 1)}\right) \frac{\partial}{\partial \zeta} &= \frac{4\mathbf{p}}{(p^2 + 1)^2} \frac{\partial}{\partial \zeta}. \end{aligned}$$

Умножим первые два соотношения на множитель  $i\mathbf{p}$ , два следующих за ними на величину  $-\frac{i(p^2 - 1)}{2}$ . В результате получаем :

$$\hat{A}_{\mathbf{p}}f(\boldsymbol{\xi}, \zeta) = i\left(\boldsymbol{\xi} \frac{\partial}{\partial \zeta} - \zeta \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\xi}}\right) f(\boldsymbol{\xi}, \zeta). \quad (28)$$

Это означает, что векторный оператор Рунге–Ленца в импульсном пространстве переходит в предсказанные ранее теоретиками три оператора инфинитезимальных вращений трехмерной сферы Фока. Отметим, что свойства коммутации на сфере Фока очевидны. Сумма квадратов (26) переходит в угловую часть четырехмерного оператора Лапласа с собственным значением  $(n^2 - 1)$ .

**6. Заключение.** Найденное дифференциальное уравнение и оператор Рунге–Ленца возвращают квантовую задачу Кулона в группу методов, использующих импульсное пространство. Кроме того, оператор можно применять для формулировок различных взаимодействий, где фигурирует группа SO(4). Метод Фока также упрощается, поскольку можно отказаться от интегрального уравнения и “остаться” в импульсном пространстве. Собственные функции не сложнее, чем в координатном пространстве и хорошо интегрируются для простых возмущений.

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика: нерелятивистская теория*, Наука, М. (1974) [L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics: Nonrelativistic Theory*, Pergamon, Oxford (1958)].
2. Н. А. Bethe and E. E. Salpeter, *Quantum mechanics of one and two-electron atoms*, Springer, Berlin (1957).



3. А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике*, Наука, М. (1971) [A. I. Baz, Ya. B. Zel'dovich, and A. M. Perelomov, *Scattering, reactions and decays in nonrelativistic quantum mechanics, Israel program for scientific translations*, Jerusalem (1969)].
4. J. L. Basdevant and J. Dalibard, *The Quantum Mechanics Solver*, Springer-Verlag, Berlin, N.Y., Heidelberg (2000).
5. С. П. Аллилуев, ЖЭТФ **33**, 200 (1957).
6. А. М. Переломов, В. С. Попов, ЖЭТФ **50**, 179 (1966).
7. M. Bander, C. Itzykson, Rev. Mod. Phys. **38**, 330 (1966).
8. В. А. Фок, *Начала квантовой механики*, Кубуч, Л. (1932); 2-изд., Наука, М. (1976).
9. V. A. Fock, Zs. f. Phys. **98**, 145 (1935); doi.org/10.1007/BF01336904.
10. V. A. Fock, *Selected Works: Quantum Mechanics and Quantum Field Theory*, Taylor & Francis, CRC Press, Boca Raton, London, N.Y. (2004).
11. L. Hulthen, Zs. f. Phys. **86**, 21 (1933); doi.org/10.1007/BF013401795.
12. B. Casselman, *Stereographic Projection*, AMS: Feature column (2014); www.ams.org/publiccurreach/...-2014-02-2015.
13. S. P. Efimov, Theor. Math. Phys. **39**, 425 (1979).
14. С. П. Ефимов, УФН **192**(9), 1019; https://Doi.org/10.3367/UFNр.2021.04.038966.
15. A. U. Klimuk and N. Y. Vilenkin, *Representation of Lie Groups and Special Functions*, Springer, Berlin, Heidelberg (1995).

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

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

**том 117**

Выпуск 10

25 мая 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>**

---

© Российская академия наук, 2023

© Редколлегия журнала “Письма в ЖЭТФ” (составитель), 2023



# Эффект разделения киральностей в кварк-глюонной плазме

З. В. Хайдуков<sup>1)</sup>

Московский физико-технический институт, 141700 Долгопрудный, Россия

Институт теоретической и экспериментальной физики, Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”,  
117259 Москва, Россия

Поступила в редакцию 23 марта 2023 г.

После переработки 11 апреля 2023 г.

Принята к публикации 11 апреля 2023 г.

Получено выражение для эффекта разделения киральностей в кварк-глюонной плазме при помощи метода полевых корреляторов путем разложения по уровням Ландау.

DOI: 10.31857/S1234567823100014, EDN: kkleza

**Введение.** Знаковым открытием явилось экспериментальное обнаружение на релятивистском коллайдере тяжелых ионов нового состояния вещества – кварк-глюонной плазмы (КГП) [1]. По свойствам эта новая фаза оказалась близка к сильно взаимодействующей, почти идеальной непрозрачной жидкости [2], хотя ранние теоретические работы утверждали [3], что должен возникнуть почти не взаимодействующий газ, состоящий из кварков и глюонов. Впоследствии решеточное моделирование [4] позволило понять, что в квантовой хромодинамике с  $(2 + 1)$  ароматами фазовый переход из адронной материи в новое состояние является кроссовером и происходит в диапазоне температур от 140 до 200 МэВ при нулевом барионном химическом потенциале. При этом КГП остается сильно взаимодействующей и при существенно больших температурах [4]. Для исследования свойств кварк-глюонной плазмы большое значение имеют эффекты, которые можно наблюдать экспериментально. К ним относится, например, эффект разделения киральностей (ЭРК) [5, 6], который заключается в возникновении аксиального тока, направленного вдоль внешнего магнитного поля в присутствии химического потенциала в равновесии. В оригинальной работе [5] вывод о существовании эффекта был получен для не взаимодействующих фермионов и в рамках эффективной теории. Для аксиального тока в безмассовом случае было получено выражение:

$$j^{5z} = \frac{e^2 \mu}{2\pi^2} B^z. \quad (1)$$

На данный момент общепринятым считается утверждение о том, что взаимодействие существенным образом влияет на ЭРК. Поэтому нас будет интересо-

вать возможность существования эффекта разделения киральностей в кварк-глюонной плазме, а точнее то, насколько сильное взаимодействие подавляет этот эффект. Все вычисления будут проделаны в рамках метода полевых корреляторов (МПК), который позволяет хорошо описать свойства как адронной фазы КХД, так и КГП [7–13].

**Метод полевых корреляторов.** Из-за сильного взаимодействия описание кварк-глюонной плазмы требует использования непертурбативных методов в дополнение к суммированию пертурбативных рядов. Мы остановим наше внимание на методе полевых корреляторов при конечных температурах во внешнем магнитном поле. Полное описание данного подхода можно найти в цикле работ [7–13]. Здесь мы опишем логику построения данного метода. Глюонное поле разбивается на пертурбативную ( $a_\mu$ ) и непертурбативную ( $A_\mu$ ) части. Предполагается, что вторая удовлетворяет определенным условиям и должна учитываться точно, первая может быть учтена в рамках теории возмущений. В непертурбативной части выделяется цветоэлектрическая ( $E_i(x)$ ) и цветомагнитная компоненты ( $B_i(x)$ ). Для них можно ввести квадратичные по напряженностям корреляторы вида<sup>2)</sup>:

$$\begin{aligned} & \frac{g^2}{N_c} \langle \text{Tr} E_i(z)(z) W(z, z') E_j(z') W^+(z, z') \rangle = \\ & = \delta_{ij} \left[ D^E(u) + D_1^E(u) + u^2 \frac{\partial^2 D_E^1}{\partial u^2} \right] + u_i u_j \frac{\partial D_1^E}{\partial u^2}, \quad (2) \end{aligned}$$

<sup>2)</sup>Коррелятор вида  $\langle W E W B \rangle$  обращается в нуль при решеточном моделировании и мог бы привести к проблеме с симметриями.

<sup>1)</sup>e-mail: khaidukov.zv@phystech.edu

$$\frac{g^2}{N_c} \langle \text{Tr} H_i(z)(z) W(z, z') H_j(z') W^+(z, z') \rangle = \delta_{ij} \left[ D^E(u) + D_1^E(u) + u_4^2 \frac{\partial^2 D_1^E}{\partial u^2} \right] - u_i u_j \frac{\partial D_1^H}{\partial u^2}, \quad (3)$$

где  $u = z - z'$ ,  $N_c$  – количество цветов,  $g$  – константа связи,  $W(z, z')$  – петля Вильсона, которая соединяет точки  $z, z'$ . При нулевых температурах скалярная функция  $D^E(x)$  приводит к возникновению закона площадей между цветовыми зарядами (натяжение струны задается в виде  $\sigma_E = \frac{1}{2} \int D^E(u) d^2u$ ,  $u = |x - y|$ ).

При температурах 160 МэВ и выше основную роль играют  $D_1^E(x)$  (не приводящий к конфаюменту) и  $D^H(x)$ , в то время как  $D^E(x)$  обращается в нуль. Первый отвечает за возникновение аналога линии Полякова, второй приводит к возникновению непертурбативной дебаевской массы [14]. В области перехода конфаюмент-деконфаюмент, а также при существенно более высоких температурах основными степенями свободы, которые вносят вклад в термодинамические потенциалы в рамках МПК, являются кварки и глюоны, которые движутся во внешних непертурбативных цветных полях. Их вклады можно учесть по отдельности, так называемое “приближение одиночной линии”. В первом приближении мы можем пренебречь рождением частиц [7, 9, 11, 12], что фактически приводит к описанию системы при помощи одночастичного базиса состояний.

Исходя из всего вышесказанного, мы можем написать:

$$\Omega = \Omega_q + \Omega_{gl}. \quad (4)$$

Из Омега-потенциала можно получить все термодинамические характеристики системы: давление, плотность энергии и т.д. Следуя [10]

$$P = 2N_c \int_0^\infty \frac{ds}{s} \sum_{n=1,2,3} (-1)^{n+1} G^n(s),$$

$$G^n(s) = \int (Dz) \exp(-K - sm_q^2) \langle \text{tr} W(C) \rangle_A,$$

где  $K = \frac{1}{4} \int_0^s \left( \frac{dz_\mu}{d\tau} \right)^2$ ,  $m_q$  – масса кварка,  $W(C)$  – петля Вильсона, определяемая путем  $C$ , усреднение производится по внешним непертурбативным полям  $A$ ,  $N_c = 3$ . В интересующей нас области температур происходит факторизация петель Вильсона [10]:

$$\langle \text{tr} W(C_n) \rangle_A = \langle L_n \rangle \langle \text{tr} W_{3d} \rangle. \quad (5)$$

$\langle L_n \rangle$  – “Поляковская линия”, которая возникает при  $n$ -кратном обороте вокруг компактного направ-

ления,  $\langle W_{3d} \rangle$  – пространственная проекция петли Вильсона. С учетом этого:

$$G^n(s) = G_4^n(s) S_3(s), \quad (6)$$

$$G_4^n(s) = \frac{1}{2\sqrt{4\pi s}} \exp\left(-\frac{n^2}{4T^2 s} - sm_q^2\right) \langle L_n \rangle. \quad (7)$$

Здесь  $S_3(s)$  3-х мерная функция Грина, построенная вдоль пространственного замкнутого пути, которая учитывает цветомагнитное взаимодействие между кварками:

$$S_3(s) = \int D^3 z \exp(-K_{3d}(s)) \langle W_{3d} \rangle = M_D^2. \quad (8)$$

Что касается  $\langle L_n \rangle$ , то для температур меньше 1 ГэВ можно показать, что выполняется приближенное соотношение:

$$\langle L_n \rangle = \langle L \rangle^n. \quad (9)$$

Здесь  $L$  – соответствует однократному обороту и задается через потенциал взаимодействия цветовых зарядов:

$$L = \exp\left(-\frac{V_1(\infty, T)}{2T}\right). \quad (10)$$

Возникает искушение интерпретировать основной вклад сильного взаимодействия (он возникает за счет  $D_1^E$ ) просто как постоянную нулевую компоненту калибровочного потенциала, однако, в выражение для аналога “Поляковской линии” входит величина:

$$V_1(r, T) = \int_0^{T^{-1}} d\nu (1 - \nu T) \int_0^r \zeta d\zeta D_1^E(\sqrt{\zeta^2 + \nu^2}). \quad (11)$$

Эта зависимость показывает, что значение потенциала в “Поляковской линии” возникает из нелокального выражения.

Магнитное поле приводит к формированию уровней Ландау. Данное утверждение в случае сильного взаимодействия является не очевидным и требует отдельного обоснования. Но в рамках решеточного моделирования [15] было показано, что можно совершенно четко утверждать, что существует нулевой уровень Ландау, и что этот уровень обладает определенной проекцией спина. Поэтому мы сфокусируемся на учете вклада нулевого уровня. Это совершенно оправданное упрощение, поскольку в [5] было показано, что, в случае, если все остальные уровни двукратно вырождены, он единственный дает вклад в ЭРК. Мы также будем полагать, что все высшие уровни Ландау являются двукратно вырожденными.

Влияние внешнего однородного магнитного поля в интеграле по траекториям приводит к замене выражения для фазового объема и энергии [10]:

$$\frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \rightarrow \frac{dp_z}{2\pi} |e_q B_z|,$$

$$E_{n_\perp}^\sigma(B) = \sqrt{p_z^2 + (\epsilon_{n_\perp}^\sigma)^2}, \quad (12)$$

$$(\epsilon_{n_\perp}^\sigma)^2 = |e_q B_z| (2n_\perp + 1 - \sigma) + M^2, \quad (13)$$

$$M^2 = \frac{M_D^2}{4} + m_q^2, \quad \sigma = \sigma^z \frac{e_q}{|e_q|}, \quad \sigma^z = \pm 1, \quad (14)$$

$$M_D^2 = c_s^2 g^4(T) T^2, \quad c_s = 0.566, \quad (15)$$

$$g^{-2}(T) = 2b_0 \ln(T/L_s) + \frac{b_1}{b_0} \ln(2 \ln(T/L_s)), \quad (16)$$

$$b_0 = \frac{\frac{11N_c}{3} - \frac{2N_f}{3}}{16\pi^2},$$

$$b_1 = \frac{\frac{34}{3}N_c^2 - \left(\frac{13}{3}N_c - \frac{1}{N_c}\right)N_f}{(16\pi^2)^2}.$$

В этих формулах  $L_s = 0.104T_c$ ,  $T_c = 160$  МэВ. Выражение для дебаевской массы  $M_D$  возникает непертурбативным образом (8) и в МПК выражается через пространственное натяжение струны [14],  $g^2(T)$  – бегущая константа связи в двухпетлевом приближении. В итоге выражение для давления можно записать в виде:

$$P_q^f = \frac{N_c |e_q B| T}{\pi^2} \sum_{n_\perp, \sigma} \sum_{n=1}^{\infty} I, \quad (17)$$

$$I = \frac{(-1)^{n+1}}{n} L^n \sqrt{(\epsilon_{n_\perp}^\sigma)^2 + m_q^2} K_1 \left( \frac{n}{T} \sqrt{(\epsilon_{n_\perp}^\sigma)^2 + m_q^2} \right).$$

Полное давление получается при помощи суммирования по всем ароматам. Такое представление наиболее удобно для вычисления ЭРК, поскольку позволяет выделить вклад низшего уровня Ландау и вычислить его термодинамические характеристики. Химический потенциал может быть введен при помощи  $A'_0 = A_0 + \mu$  и приводит в (17) к замене:

$$L^n \rightarrow L^n \cosh \left( \frac{\mu n}{T} \right). \quad (18)$$

**Вычисление аксиального тока.** Сосредоточимся на вычислении вклада низшего уровня Ландау<sup>3)</sup>. В киральном базисе:

$$j^{5z} = \psi^\dagger \gamma^0 \gamma^z \gamma^5 \psi = \psi_L^\dagger \sigma^z \psi_L + \psi_R^\dagger \sigma^z \psi_R. \quad (19)$$

Если фермионы являются собственными состояниями  $\sigma^z \psi_{R/L} = \pm \psi_{R/L}$  с одинаковыми собственными значениями, выражение переписывается:

$$j^{5z} = \pm (\psi_L^\dagger \psi_L + \psi_R^\dagger \psi_R) = j^0. \quad (20)$$

<sup>3)</sup>Мы не рассматриваем вопрос о влиянии магнитного поля на линию Полякова, поскольку в области, которая доступна для экспериментальной проверки, этот вопрос неактуален.

В случае нулевого уровня Ландау это приводит к соотношению:

$$\langle j^{5z} \rangle_{B,T} = \pm \langle j_0 \rangle_{LLL,T,\mu}. \quad (21)$$

А значит, мы можем воспользоваться известным термодинамическим соотношением:

$$V^{-1} \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} |_{LLL,V,T} = - \langle j^0 \rangle_{>T,V} \quad (22)$$

и получить выражение для ЭРК:

$$\langle j^{5z} \rangle_{>T,V} = \mp N_c T \frac{e_q B_z}{2\pi} \frac{\partial}{\partial \mu} (\chi(\mu) + \chi(-\mu)), \quad (23)$$

$$\chi(\mu) = \int \frac{dp_z}{2\pi} \ln \left( 1 + \exp \left( \frac{\tilde{\mu} - E_{n_\perp}^\sigma(B)}{T} \right) \right), \quad (24)$$

$$\tilde{\mu} = \mu - V_1(\infty, T)/2. \quad (25)$$

Здесь  $E_{n_\perp}^\sigma(B)$  задается (12),  $V_1(\infty, T)$  определен в (11). Результаты вычисления для низшего уровня Ландау приведены на рис. 1. На графике мы нормировали результат вычисления аксиального тока на коэффициент  $(\mu B N_c \sum_{i=u,d,s} q_i^2)^{-1}$ ,  $i$  соответствует аромату кварков, для  $\mu$  мы взяли 10 МэВ. Мы также отметили коэффициент для невзаимодействующей теории  $(\frac{1}{2\pi^2})$ .

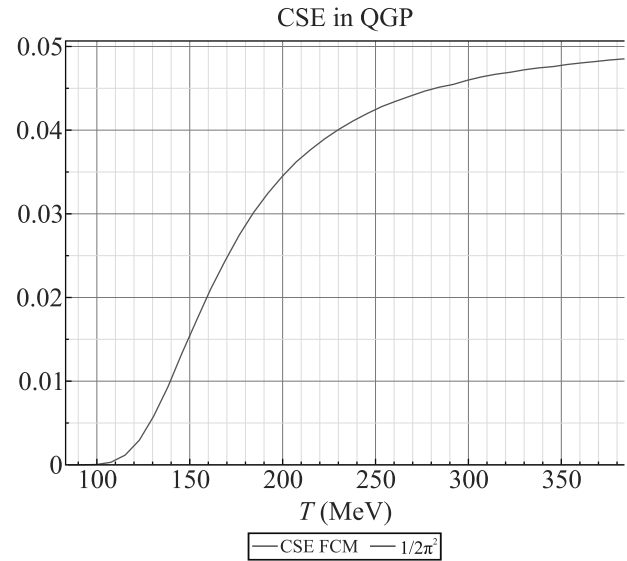


Рис. 1. (Цветной онлайн) Величина аксиального тока в ЭРК с нормировочным коэффициентом  $(\mu B N_c \sum_{i=u,d,s} q_i^2)^{-1}$

С точки зрения МПК этот результат понимается достаточно просто: при физических массах кварков в адронной фазе КХД ЭРК сильно подавлен, поскольку энергия любого возбуждения связана с энер-

гией натяжения струны, которое значительно больше температуры и выбранного нами химического потенциала. Основной вклад в термодинамическое описание в области перехода конфаймент-деконфаймент  $T = 140\text{--}200$  МэВ вносит “Поляковская линия”, которая растет очень быстро и, как следствие, обеспечивает быстрый рост основных термодинамических потенциалов. При температурах выше 300 МэВ “Поляковская линия” мало отлична от единицы, и основной эффект связан с влиянием непертурбативной дебаевской массы, которая ведет себя как  $M_D^2 \sim g^4(T)T^2$ . В фермионном распределении она всегда делится на квадрат температуры, а значит, ее влияние определяется четвертой степенью константы связи и коэффициентом в выражении (15).

**Обсуждение и заключение.** Нами получено выражение для эффекта разделения киральностей в методе полевых корреляторов при помощи разложения по уровням Ландау и учете вклада нулевого уровня. Было показано, что аксиальный ток, направленный вдоль оси  $z$ , равен плотности заряда на низшем уровне Ландау. Это свойство остается верным и в случае присутствия сильного взаимодействия. Наши результаты были получены наиболее наглядным способом, но все вычисления также могут быть проделаны при помощи формулы линейного отклика, которую удобнее использовать, например, при вычислении кирального вихревого эффекта в кварк-глюонной плазме. Это связано со сложностями распространения МПК на КГП с вращением. Несомненным достоинством данного метода является сведение задачи вычисления аксиального тока к вычислению производной термодинамического потенциала для низшего уровня. Это обстоятельство позволяет утверждать, что в случае точного описания термодинамики даже на уровне “совпадения теоретических кривых с экспериментом”<sup>4)</sup> мы получаем корректный количественный ответ для ЭРК. К сожалению, рассмотрение вкладов высших уровней Ландау в данном случае требует более подробного изучения, поскольку наше предположение о двукратном вырождении уровней с одной стороны приводит к заключению о равенстве нулю вклада от высших уровней, с другой – может оказаться чересчур оптимистичным, поскольку взаимодействия могут при-

водить к перемешиванию уровней Ландау. Учет этих вкладов мы оставляем для дальнейшего изучения. Также было бы интересно сравнить полученные нами результаты с результатами, которые были получены в рамках недавней работы [16].

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда # 21-12-00237 и при поддержке гранта Фонда развития теоретической физики и математики “БАЗИС” # 22-1-3-59-1.

1. K. Adcox, S.S. Adler, S. Afanasiev et al. (Collaboration), Nucl. Phys. A **757**, 184 (2005).
2. R. Pasechnik and M. Sumner, Universe **3**, 7 (2017).
3. J. C. Collins and M. J. Perry, Phys. Rev. Lett. **34**, 1353 (1975).
4. S. Borsanyi, Z. Fodor, C. Hoelbling et al. (Collaboration), JHEP **1009**, 73 (2010).
5. M. A. Metlitski and A. R. Zhitnitsky, Phys. Rev. D **72**, 045011 (2006).
6. M. Puhf and P. V. Buividovich, Phys. Rev. Lett. **118**(19), 192003 (2017); arXiv: 1611.07263 [hep-lat].
7. Yu. A. Simonov and M. A. Trusov, Phys. Lett. B **650**, 36 (2007).
8. Yu. A. Simonov and M. A. Trusov, Pis'ma v ZhETF **85**(12), 730 (2007) [JETP Lett. **85**, 730 (2007)].
9. V. D. Orlovsky and Yu. A. Simonov, Phys. Rev. D **89**, 054012 (2014); arXiv:1311.1087v2.
10. M. A. Andreichikova and Yu. A. Simonov, Eur. Phys. J. C **78**, 420 ((2018)); <https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-018-5916-8>.
11. H. G. Dosch, Phys. Lett. B **190**, 177 (1987).
12. H. G. Dosch and Yu. A. Simonov, Phys. Lett. B **205**, 339 (1988).
13. Yu. A. Simonov and J. A. Tjon, Ann. Phys. **228**, 1 (1993).
14. N. O. Agasian and Yu. A. Simonov, Phys. Lett. B **639**, 82 (2006); arXiv:hep-ph/0604004v3; <https://doi.org/10.1016/j.physletb.2006.06.019>.
15. F. Bruckmann, G. Endrödi, M. Giordano, S. D. Katz, T. G. Kovács, F. Pittler, and J. Wellenhofer, Phys. Rev. D **96**, 074506 (2017); <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.96.074506>; arXiv:1705.10210.
16. R. A. Abramchuck and M. A. Zubkov, <https://arxiv.org/abs/2301.12261>.

<sup>4)</sup> Это не исключает требования логической согласованности теории.

# Потенциал взаимодействия протонов и атомов водорода с металлами

П. Ю. Бабенко<sup>1)</sup>, В. С. Михайлов, А. Н. Зиновьев

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, 194021 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 24 марта 2023 г.

После переработки 24 марта 2023 г.

Принята к публикации 20 апреля 2023 г.

Предложены приближенные формулы потенциалов для протонов и атомов водорода в металле и показано, что учет эффектов экранирования заряда налетающей частицы позволяет объяснить различие потенциалов межатомного взаимодействия, полученных в рамках теории функционала плотности для газовой фазы и потенциалов, полученных авторами при обработке экспериментальных данных о рассеянии атомных частиц от поверхности твердого тела. Установлено влияние экранировки в потенциале на угловые распределения атомных частиц после прохождения тонких пленок вещества и на ядерные тормозные способности.

DOI: 10.31857/S1234567823100026, EDN: cknvprq

Хорошо известно, что при движении ионов в металле поляризация среды приводит к экранированию потенциала иона. В случае иона, движущегося с некоторой скоростью в среде, отклик электронной подсистемы происходит с запаздыванием в пространстве и во времени, что приводит к возникновению кильватерного потенциала. Нойфелд и Ричи [1] развили теорию кильватерного взаимодействия, которая нашла экспериментальное подтверждение. Обзор работ по динамическому экранированию ионов при движении в твердом теле дан в статье [2]. Экранирование и кильватерный эффект хорошо описываются возбуждением плазмонов [3].

Нас будет интересовать случай столкновений со скоростями  $v < 1$  а.е., т.е. статическая экранировка. В обзоре Дедкова [4] получены общие выражения для короткодействующей части экранированного потенциала (с учетом собственных электронов). Из современных работ можно отметить работы по расчету многочастичных потенциалов [5–8] для описания эксперимента методами молекулярной динамики. В работе [9] рассматривалась модель взаимодействия заряженных частиц в неидеальной квазиклассической плазме.

Потенциал взаимодействия в приближении функционала плотности рассчитывается как разность энергии системы атомов при расстоянии  $R$  и  $R = \infty$ . Если мы не будем учитывать возмущение электронной плотности системы, то члены с кинетической энергией электронов исчезают и потенциал может быть записан в виде:

$$U(R) = \frac{Z_1 Z_2}{R} - Z_1 N_2 \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \rho(r) \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi, \quad (1)$$

где первый член описывает кулоновское взаимодействие ядер, а второй член – энергию взаимодействия между зарядом  $Z_1$  и электронами второй частицы,  $N_2$  – число электронов иона решетки. Запишем  $\rho(r)$  в виде [4]:

$$\rho(r) = \frac{N_2}{4\pi a^2 r} \sum_{i=1}^3 A_i B_i^2 \exp\left(-B_i \frac{r}{a}\right), \quad (2)$$

где  $A_i$  и  $B_i$  – коэффициенты разложения в потенциале Мольера [10]:

$$A = \begin{pmatrix} 0.1 \\ 0.55 \\ 0.35 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 6 \\ 1.2 \\ 0.3 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Согласно работе [11] константа экранирования для иона с зарядом  $Z_2$  и числом электронов  $N_2$  может быть записана в виде:

$$a = 0.8853 a_B Z_2^{-1.2} N_2^{0.87}, \quad a_B = 0.529 \text{ \AA}. \quad (4)$$

Подставляя  $\rho(r)$  в виде (2), записывая  $|\mathbf{R} - \mathbf{r}| = \sqrt{R^2 + r^2 - 2Rr \cos \theta}$  и интегрируя по  $\theta$  и  $\varphi$ , имеем:

$$U(R) = \frac{Z_1 Z_2}{R} - \frac{Z_1 N_2}{2Ra^2} \times \sum_{i=1}^3 A_i B_i^2 \int_0^\infty dr \exp\left(-B_i \frac{r}{a}\right) (R + r - |R - r|). \quad (5)$$

<sup>1)</sup>e-mail: babenko@npd.ioffe.ru



Разбивая интеграл на две части  $r < R$  и  $r > R$ , получаем:

$$U(R) = \frac{Z_1(Z_2 - N_2)}{R} + \frac{Z_1 N_2}{R} \sum_{i=1}^3 A_i \exp\left(-B_i \frac{R}{a}\right). \quad (6)$$

В итоге нами получена формула, аналогичная предложенной в [11], которая описывает взаимодействие иона с зарядом  $Z_1$  с ионом ( $N_2 < Z_2$ ) или атомом решетки ( $N_2 = Z_2$ ).

На рисунке 1 представлены потенциалы для системы H-Au, полученные в рамках DFT приближения (*Density Functional Theory* – теория функционала плотности) для газовой фазы и потенциал, описанный формулой (6). Как видно, они неплохо согласуются. На рисунке 1 представлены также потенциалы “атомная частица – твердое тело”, полученные нами из экспериментальных данных об энергетических спектрах и угловых зависимостях обратно рассеянных частиц [12], а также из анализа угловых распределений частиц, прошедших тонкую пленку золота [13]. Как видно, потенциал взаимодействия “ион – твердое тело”, полученный из эксперимента, заметно отличается от потенциала, описывающего столкновение в газовой фазе.

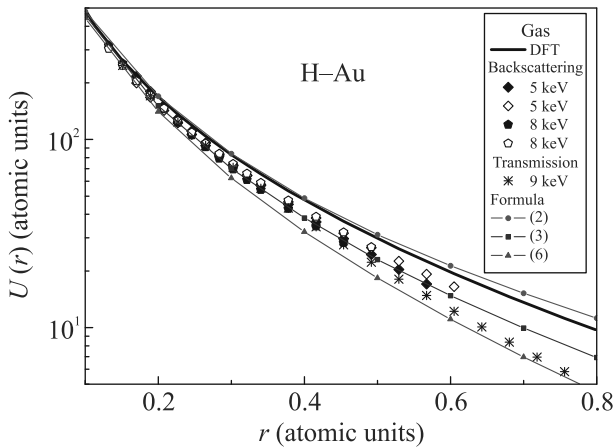


Рис. 1. Потенциал межатомного взаимодействия в зависимости от расстояния. Система H-Au. Приведен потенциал DFT для газовой фазы. Точками показаны данные из работ [12, 13], в которых значения потенциалов получены обработкой экспериментальных данных о рассеянии частиц на поверхности или прохождения через тонкие пленки. Линии с точками – расчет по формулам (6), (8), (11)

В случае взаимодействия иона в твердом теле кулоновский заряд иона экранирован электронами проводимости и потенциал иона может быть записан в виде:

$$U_1(R) = \frac{Z_1}{R} \exp\left(-\frac{R}{R_D}\right), \quad (7)$$

где  $R_D$  – длина экранирования Дебая [14]. Для золота  $R_D = 1.358$  а.е. Заменяя в формуле (1) кулоновский потенциал на потенциал экранированного кулоновского заряда и проводя аналогичное интегрирование, получаем потенциал взаимодействия иона, экранированного электронами проводимости, с решеткой металла (см. рис. 1):

$$U(R) = \frac{Z_1(Z_2 - N_2)}{R} \exp\left(-\frac{R}{R_D}\right) + \frac{Z_1 N_2}{R} \sum_{i=1}^3 A_i \exp\left(-B_i \frac{R}{a}\right) \exp\left(-\frac{R}{R_D}\right). \quad (8)$$

В случае атома водорода заряд ядра протона экранируется связанным электроном. В книге [15] для потенциала атома водорода из решения уравнения Пуассона получено выражение:

$$U_2(R) = \left(\frac{1}{R} + \frac{1}{a_B}\right) \exp\left(-\frac{2R}{a_B}\right), \quad (9)$$

здесь радиус Бора  $a_B = 1$  в атомных единицах. Тот же результат может быть получен, если в формуле (1) записать электронную плотность для атома водорода в виде:

$$\rho(r) = \frac{1}{\pi a^3} \exp\left(-2\frac{r}{a_B}\right), \quad (10)$$

и провести соответствующее интегрирование по электронным координатам.

Заменяя в формуле (6) член  $Z_1/R$  во втором слагаемом на  $U_2(R)$  и учитывая, что  $Z_2 = N_2$ , получаем выражение для потенциала взаимодействия нейтрального атома с решеткой твердого тела:

$$U(R) = \frac{Z_1 Z_2}{R} \sum_{i=1}^3 A_i \exp\left(-B_i \frac{R}{a}\right) \times \exp\left(-\frac{2R}{a_B}\right) \left(1 + \frac{R}{a_B}\right). \quad (11)$$

Как видно из рис. 1, потенциалы, учитывающие экранировку, неплохо описывают экспериментальные данные о потенциале для системы “водородная частица в металле”.

Для проверки полученных результатов мы провели моделирование угловых зависимостей частиц, прошедших тонкую пленку золота толщиной  $143 \text{ \AA}$  с начальной энергией  $9 \text{ кэВ}$ , используя потенциалы (6), (8), (11). Методика расчета описана в работе [13]. Учитывались многократное рассеяние атомов

на аморфной мишени и тепловые колебания атомов мишени при комнатной температуре. Торможение на электронах рассматривалось с учетом поправки на многократность соударений, предложенной в работе [16]. Результаты моделирования приведены на рис. 2. Согласно работе [17] доля вышедших нейтральных атомов при начальной энергии 9 кэВ составляет 87.5%. Расчет для композитного пучка представлен на рис. 2 жирной линией и хорошо согласуется с экспериментальными данными.

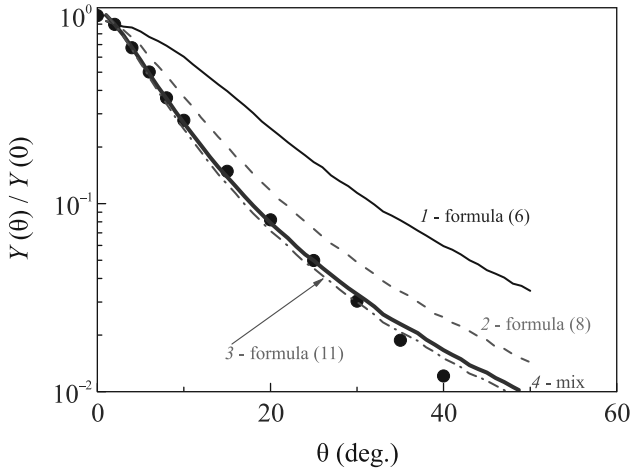


Рис. 2. (Цветной онлайн) Угловое распределение частиц, прошедших тонкую пленку золота. Точки – эксперимент [18]. Линии – наш расчет для потенциалов (6), (8), (11). Жирная линия – расчет для композитного пучка с содержанием нейтральных атомов 87.5%

Учет экранировки в потенциале влияет также на расчет ядерных тормозных способностей (ЯТС) при торможении частиц в материалах.

Ядерные тормозные способности удобно рассчитывать в системе центра масс (СЦМ), чтобы избежать неоднозначности зависимости угла рассеяния  $\theta$  от прицельного параметра  $p$ , которая обычно возникает при рассеянии на потенциалах, имеющих потенциальные ямы. Тормозная способность  $dE/dx$  равна:

$$\frac{dE}{dx} = N \int_0^\infty 2\pi p \cdot T[\theta(p)] dp, \quad (12)$$

где  $N$  – плотность мишени. Потеря энергии при столкновении  $T[\theta(p)]$  выражается формулой:

$$T[\theta(p)] = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} \sin^2 \left[ \frac{\theta(p)}{2} \right] E, \quad (13)$$

$M_1$  и  $M_2$  – массы сталкивающихся частиц,  $\theta(p)$  – угол рассеяния в СЦМ,  $E$  – энергия соударения.

$$\theta(p) = \pi - 2p \cdot \int_{r_0}^\infty \frac{dr}{r^2 \sqrt{1 - \frac{U(r)}{E_{CM}} - \frac{p^2}{r^2}}}. \quad (14)$$

Здесь  $U(r)$  – потенциал взаимодействия,  $E_{CM} = E \cdot M_2 / (M_1 + M_2)$  – энергия столкновения в СЦМ,  $r_0$  – корень уравнения:

$$1 - \frac{U(r_0)}{E_{CM}} - \frac{p^2}{r_0^2} = 0. \quad (15)$$

На рисунке 3 приведены ядерные тормозные способности в зависимости от энергии налетающих частиц для потенциалов, описываемых формулами (6), (8), (11). Как видно из рис. 3 учет экранировки значительно уменьшает ядерные тормозные способности при прохождении протонов (8) и атомов водорода (11), по сравнению с ЯТС для газовой мишени (расчет с потенциалом Мольера – Moliere).

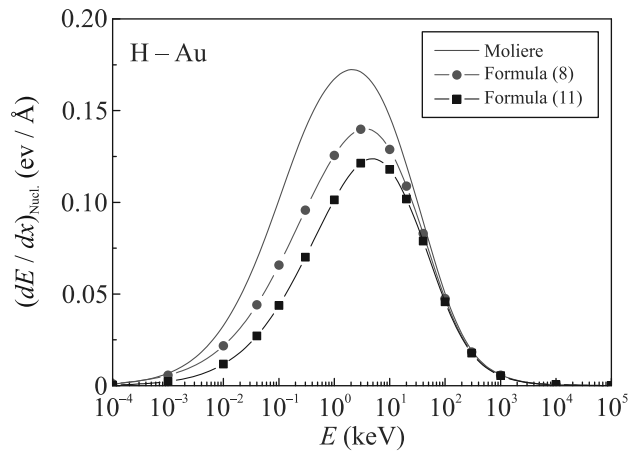


Рис. 3. (Цветной онлайн) Ядерные тормозные способности в зависимости от энергии бомбардирующих частиц. Рассматривается система H-Au. Расчет производится для потенциала Мольера и потенциалов, полученных по формуле (8) для протона в металле и формуле (11) для атома водорода

Показано, что учет эффектов экранирования заряда налетающей частицы позволяет объяснить различие потенциалов межатомного взаимодействия, полученных в рамках теории функционала плотности для газовой фазы и потенциалов, полученных авторами при обработке экспериментальных данных о рассеянии атомных частиц от поверхности твердого тела.

Продемонстрировано влияние экранировки в потенциале на угловые распределения атомных частиц после прохождения тонких пленок вещества и на результаты расчетов ядерных тормозных способностей при торможении частиц в материалах.

1. J. Neufeld and R. H. Ritchie, Phys. Rev. **98**, 1632 (1955).
2. P. M. Echenique, F. Flores, and R. H. Ritchie, Solid State Phys. **43**, 229 (1990).
3. С. А. Майер, *Плазмоника: теория и приложения*, НИЦ “Регулярная и хаотическая динамика”, М. (2011).
4. Г. В. Дедков, УФН **165**, 919 (1995).
5. С. Bjorkas, N. Juslin, H. Timko, K. Vortler, K. Nordlund, K. Henriksson, and P. Erhart, J. Phys.: Condens. Matter **21**, 445002 (2009).
6. М. В. Прокофьев, В. В. Светухин, М. Ю. Тихончев, Изв. Самарского НЦ РАН **15**, 1024 (2013).
7. N. Juslina, P. Erhart, P. Träskelin, J. Nord, K. O. E. Henriksson, K. Nordlund, E. Salonen, and K. Albe, J. Appl. Phys. **98**, 123520 (2005).
8. H. W. Sheng, M. J. Kramer, A. Cadien, T. Fujita, and M. W. Chen, Phys. Rev. B **83**, 134118 (2011).
9. K. N. Dzhumagulova, E. O. Shalenov, and G. L. Gabdullina, Phys. Plasmas **20**, 042702 (2013).
10. В. Экштайн, *Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела*, Мир, М. (1995).
11. K. Saitoh, Rad. Eff. **82**, 205 (1984).
12. П. Ю. Бабенко, А. Н. Зиновьев, В. С. Михайлов, Д. С. Тенсин, А. П. Шергин, Письма в ЖТФ **48**, 10 (2022).
13. П. Ю. Бабенко, А. Н. Зиновьев, Д. С. Тенсин, ЖТФ **92**, 1643 (2022).
14. C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 8th ed., John Wiley & Sons, NY (2005).
15. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика (нерелятивистская теория)*, т. 3, Физматлит, М. (2004).
16. А. Н. Зиновьев, П. Ю. Бабенко, Письма в ЖЭТФ **115**, 603 (2022).
17. R. Blume, W. Eckstein, and H. Verbeek, NIM **168**, 57 (1980).
18. M. Fama, G. H. Lantschner, J. C. Eckardt, C. D. Denton, and N. R. Arista, NIMB **164–165**, 241 (2000).

# Дифракционно-ограниченная фокусировка звуковых волн мезоразмерной плоской Янус-линзой<sup>1)</sup>

О. В. Минин<sup>+\*2)</sup>, С. Джоу<sup>×3)</sup>, П. Ф. Баранов<sup>+</sup>, И. В. Минин<sup>+\*o)</sup>

<sup>+</sup>Томский политехнический университет, 634050 Томск, Россия

<sup>\*</sup>Сибирский государственный университет геосистем и технологий, 630010 Новосибирск, Россия

<sup>×</sup>Jiangsu Key Laboratory of Advanced Manufacturing Technology, Faculty of Mechanical and Material Engineering, Huaiyin Institute of Technology, 223003 Huai'an, China

<sup>o</sup>Филиал Института физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН “КТИПМ”, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 9 марта 2023 г.

После переработки 2 апреля 2023 г.

Принята к публикации 6 апреля 2023 г.

Представлены результаты численного моделирования и экспериментального подтверждения анизотропной фокусировки мезоразмерной (параметр размера Ми около 18) звуковой кубической линзы на основе V-образных пластинчатых структур. Впервые показано, что такая линза с размером грани около 3 длин волн обеспечивает фокусировку звуковой волны в воздухе в дифракционно-ограниченную область. При инверсионной геометрии структуры линза полностью отражает падающую звуковую волну.

DOI: 10.31857/S1234567823100038, EDN: skonwd

**Введение.** Звук постоянно присутствует в нашей повседневной жизни в разнообразных сферах. Акустические линзы могут применяться в различных областях физики, инженерии и в медицине. Однако их реализация по-прежнему является сложной и актуальной задачей, поскольку, в частности, существует не так много природных материалов, обладающих свойствами, необходимыми для изготовления звуковых линз [1, 2], поскольку природные материалы, как правило, не могут одновременно обеспечивать небольшую скорость звука и высокую плотность.

В настоящее время существуют различные типы акустических линз, основанных на различных физических явлениях: на дифракции Френеля [3, 4], на акустических фотонных 2D и 3D кристаллах [5–8], на основе акустических метаматериалов [9] и резонаторов Гельмгольца [10], градиентных (GRIN) структур [11], включая акустические линзы Люнеберга [12] и т.д. Однако акустические материалы с градиентным показателем преломления в природе не встречаются.

Другая возможность получения современных акустических линз заключается в использовании

заполненных газом сферических [13–15] или мезоразмерных кубических линз с возможностью дифракционной ограниченной фокусировки [16, 17]. Акустические линзы по пределу фокусировки имеют те же ограничения, что и электромагнитные (оптические), т.е. ограничены разрешением в половину длины волны из-за дифракции. Кроме того, газонаполненные акустические линзы требуют применения газов, зачастую обладающих вредными для здоровья и окружающей среды свойствами.

Заметим, что рассеиватели с параметром размера Ми  $q = kL = 2\pi/\lambda L$  ( $L$  – характерный внешний размер структуры,  $k$  – волновое число) около 5...50, в последнее время вызывают особый интерес для исследователей. Это промежуточное значение между дипольными частицами ( $q \ll 1$ ), частицами характеризующиеся резонансами Ми ( $q \sim 1$ , так называемый Ми-треника) и крупными частицами ( $q > 100$ ), рассеяние на которых можно объяснить с помощью аппарата геометрической оптики (в том числе классические линзы и зеркала – на звуковых частотах диаметр звуковой линзы составляет около 2 м [18]). Поэтому рассеиватели с параметром размера  $q \sim 10$  иногда еще называют частица-линза [19]. Феномен “акустоструи” [20, 21], распространяющий концепцию фотонной наноструи на акустические волны, обнаруженный Мининными посредством наблюдения подобия волновых уравнений и уравне-

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

<sup>2)</sup>e-mail: prof.minin@gmail.com

<sup>3)</sup>Song Zhou.

ний Максвелла в электромагнитном спектре, потенциально открывает двери для получения субволнового размера акустического фокуса. Необходимо подчеркнуть, что распространение и локализация акустических волн через мезомасштабные (характерный размер составляет несколько длин волн) не могут быть предсказаны с помощью геометрической оптики [19, 21, 22].

С другой стороны, акустические рефракционные линзы, состоящие из субволновых “модификаторов” поля, т.е. пластин, стержней или дисков, и фокусирующих звук в дальней зоне, известны давно [23]. Пластинчатая акустическая рефракционная линза была предложена Коком в 1948 году [24]. Искусственный материал линзы был образован из решетки параллельных пластин, установленных под углом  $\theta$  к падающему излучению. В этом случае, проходимый акустической волной путь между наклонно расположенными пластинами возрастает в  $1/\cos\theta$  раз, что соответствует эффективному показателю преломления  $n = 1/\cos\theta$ . Модификация таких линз состоит из плоской пластины с неравномерным набором зигзагообразных щелей [25], в которой выходы щелей действуют как вторичные источники субволнового размера [26].

Основная цель статьи – показать возможности акустической (звуковой) анизотропной фокусировки с помощью мезоразмерной кубической Янус-линзы, состоящей из решетки V-образных параллельных пластин. Янус-линза – термин, введенный в работе [27], означает в данном случае разновидность мезоструктуры, состоящей из нескольких разных частей (состава и/или формы), с отличающимися свойствами. На основе моделирования, подтвержденного экспериментом, мы демонстрируем возможность дифракционно-ограниченной фокусировки звуковых волн в воздухе через линзу с плоскими внешними поверхностями и размерами граней равными 3 длины волны.

#### Модель и экспериментальная установка.

Для численного моделирования был использован метод конечных элементов, реализованный в 2D-акустической модели COMSOL Multiphysics Modeling [28] для сокращения высоких вычислительных и временных затрат, которых требует 3D-моделирование. Использовалась свободная треугольная сетка с максимальным размером элемента  $\lambda/8$  с применением стандартной процедуры адаптивного сгущения сетки в областях с сильным градиентом давления. Падающая (освещающая) волна в симуляциях была выбрана плоской. В экспериментах она обеспечивалась выбором расстояния

между излучателем и линзой, соответствующего условию дальней зоны.

В качестве материала пластин частицы-линзы в расчетах и экспериментах был использован пластик АБС, акустическое сопротивление которого примерно в 6000 раз больше, чем у воздуха. Поэтому такие рассеиватели можно считать акустически жесткими [11]. Значения скорости звука ( $C$ ) и плотности ( $\rho$ ), использованные для АБС и воздуха, составляли  $C_{\text{abc}} = 2250$  м/с,  $\rho_{\text{abc}} = 1050$  кг/м<sup>3</sup>,  $C_{\text{sabs}} = 1025$  м/с,  $C_{\text{air}} = 343$  м/с,  $\rho_{\text{air}} = 1.21$  кг/м<sup>3</sup>, где  $C_{\text{sabs}}$  – поперечная скорость звука в пластике АБС [21, 29].

Для экспериментальной проверки фокусирующих свойств рассматриваемой Янус-линзы, с помощью 3D-принтера была создана соответствующая кубическая структура. Экспериментальные измерения проводились в безэховой камере, устройство которой и методика измерений были аналогичны ранее описанным в [4, 16, 17, 30, 31].

**Результаты и обсуждения.** Внешний вид Янус-линзы и ее конструктивные особенности представлены на рис. 1. Ранее нами с коллегами было показано, что для эффективной фокусировки акустических волн достаточно обеспечить внешний размер газонаполненной частицы-линзы около 3 длин волн [16, 17]. В настоящей работе линза была спроектирована на частоту 5000 Гц, толщина АБС-пластин составляла  $s = 1.5$  мм, расстояние между пластинами –  $t = 11$  мм, угол наклона пластин  $\alpha = 62^\circ$ . Размер граней кубической структуры составлял  $L = 200$  мм или около 3 длин волн. Таким образом, параметр размера Ми [19, 32] Янус-линзы удовлетворяет условию мезоразмерности и соответствует значению  $q \sim 18$ . Размеры частицы-линзы выбраны из условия, с одной стороны, возможности ее изготовления на 3D принтере и достаточной прочности конструкции, а с другой стороны – из условия минимального внешнего размера структуры. Далее на протяжении всей работы мы будем использовать не абсолютные значения геометрических параметров структуры, а значения относительно падающей длины волны в воздухе.

Нормированное на параметры падающей плоской волны распределение интенсивности звуковой волны  $I = p^2/\rho c$  [31] было изучено на основе моделирования и подтверждающих экспериментов. Экспериментальные исследования проводили с помощью специально разработанного синхронного усилителя с дифференциальным входом, обработка проводилась на основе алгоритма цифровой обработки дифференциального сигнала в синхронных усилителях, что позволило уменьшить неопределенность измерений. На

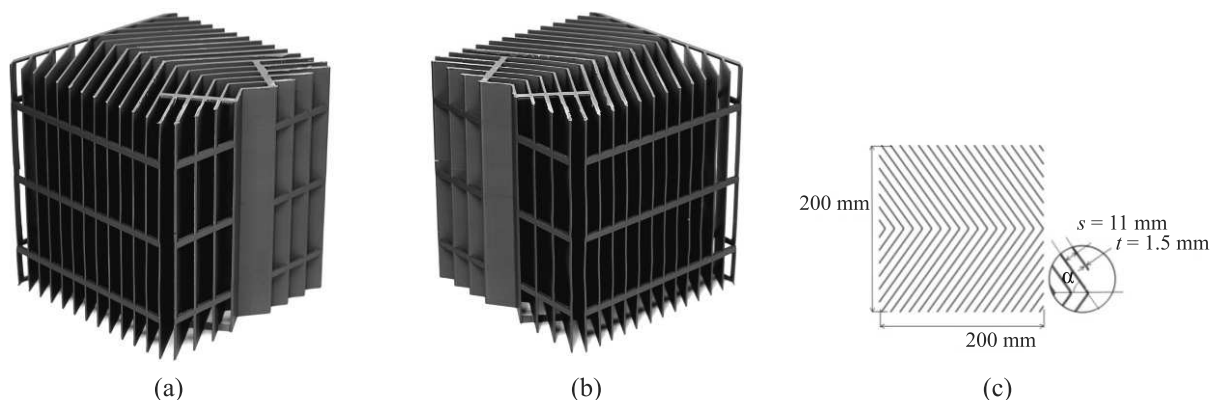


Рис. 1. Акустическая мезоразмерная Янус-линза на основе V-образных пластин ((a), (b) – разные ракурсы) и ее конструктивные параметры (c) для частоты 5000 Гц

рисунке 2 показаны результаты моделирования распределения интенсивности звука на частотах 4.8, 5.0 и 5.2 кГц для угла наклона пластин  $\alpha = 62^\circ$ . Линза была спроектирована на частоту 5 кГц.

Из представленных результатов моделирования видно, что падающая волна дифрагирует вокруг внешней поверхности кубической структуры. Фокусировка звуковой волны осуществляется за счет комбинации дифракции вокруг структуры и конструктивной интерференции с прошедшей через V-образную пластинчатую структуру волной в области теневой части линзы.

В единицах длины волны частоты 4800, 5000 и 5200 Гц соответствуют размерам линзы  $2.79\lambda$ ,  $2.92\lambda$  и  $3.03\lambda$  соответственно. Хорошо видно, что область слабой локализации давления акустического поля начинает формироваться при относительном размере ребра кубической линзы, равном  $2.79\lambda$  (4800 Гц, рис. 2a). При размере стороны куба, равном  $2.92\lambda$  (5000 Гц, рис. 2b), область фокусировки вблизи теневой поверхности линзы четко сформирована и имеет симметричную структуру акустической струи [8, 16, 18]. При этом положение максимума интенсивности поля вдоль акустической струи немного смещается влево в сторону теневой поверхности линзы. При дальнейшем увеличении эффективного размера куба до  $3.03\lambda$  (5200 Гц) фокусирующий эффект снижается, область максимальной локализации акустического поля еще больше смещается влево и практически совпадает с теневой поверхностью линзы.

Моделирование инверсионной геометрии Янус-линзы (рис. 2d) демонстрирует анизотропные свойства фокусировки звуковой волны. В этом случае падающая волна практически полностью отражается от внешней поверхности структуры и в теневой области линзы прошедшее поле практически отсутствует.

Наличие максимума в теневой области линзы при одном направлении распространения волны (рис. 2b) и отсутствие сигнала в теневой области линзы при падении волны на линзу с противоположной стороны (рис. 2d) не противоречит соотношению взаимности, поскольку указанные эффекты являются следствием асимметричного распространения волн при разной ориентации линзы из-за ее анизотропной структуры. Заметим, что это не эквивалентно переключению источника и приемника для проверки принципа взаимности. А асимметричное распространение – это не то же самое, что невзаимность.

Хорошо известно, что акустическая струя, аналог фотонной струи в электромагнитном спектре, представляет собой узкий локализованный интенсивный пучок, который может распространяться на расстояние, превышающее длину волны  $\lambda$ , после выхода из теневой поверхности освещенного проницаемого объекта с характерным размером больше длины волны и образуется благодаря интерференции рассеянного (дифрагированного) на объекте (частицы-линзы) и прошедшего через нее полей [8, 20, 33, 34, 35]. Как следует из рис. 2a–c, на разных частотах только каналы, образованные V-образными пластинами в теневой части частицы-линзы, вносят вклад в формирование акустической струи, когда течение между пластинами выходит в ее теневую часть и интерферирует с рассеянным на внешней поверхности частице-линзе полем (рис. 2b). Происходит преобразование распространяющихся волн в волны, распространяющиеся вдоль боковой грани частицы-линзы. Когда волна проходит по каналам между пластинами в теневой части линзы (рис. 2b), часть звуковой волны выходит в осевом направлении в ее теневой части, происходит перенаправление поля давления и формирование акустической струи в ближ-

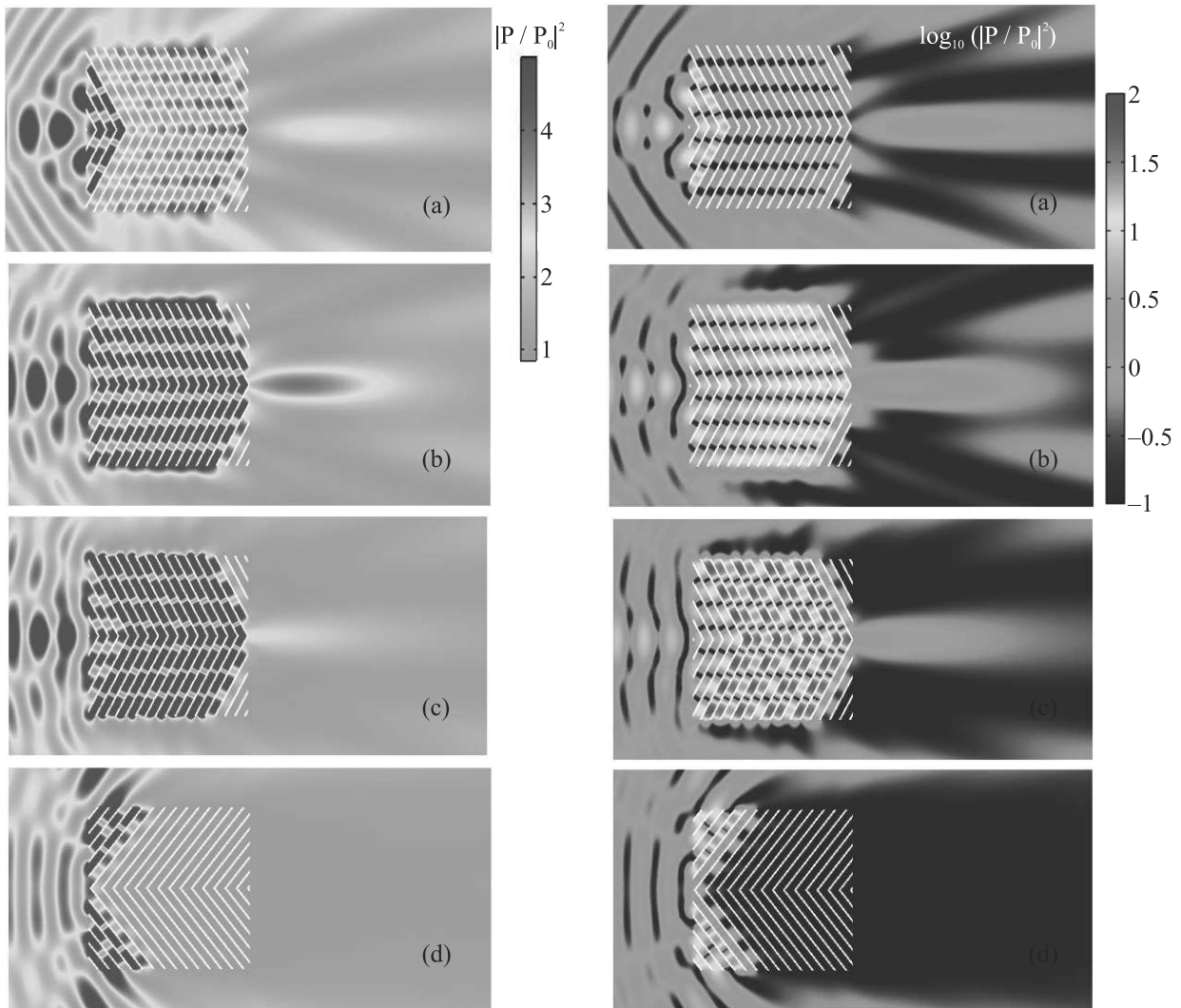


Рис. 2. (Цветной онлайн) Нормализованные на параметры падающей плоской волны распределения интенсивности звука на частотах 4.8 кГц (а), 5.0 кГц (b), и 5.2 кГц (с) соответственно для угла наклона пластин  $\alpha = 62^\circ$ . На рисунке (d) показано распределение интенсивности звука для инверсионной геометрии кубической Янус-линзы на частоте 5.0 кГц. Звуковая волна распространялась слева направо. В левой колонке шкала интенсивности была выбрана из условия наилучшего визуального изображения области фокусировки в теневой части линзы. В правой колонке показаны те же самые результаты, но для логарифма интенсивности, демонстрирующие структуру волн внутри Янус линзы

нем поле – на расстоянии менее длины волны от теневой поверхности линзы. В частности, отсутствие конструктивной интерференции рассеянных на кубической частице волн с прошедшими через частицу, например, в случае металлического куба таких же размеров [8], приводит к отсутствию формирования акустической струи [8, 20]. В случае проницаемой кубической частицы (газонаполненной, диэлектрической) [16, 17, 36] акустическая струя стабильно формируется.

Отметим, что число “пластин” (каналов), расположенных вдоль боковой грани линзы, определяет-

ся расстоянием между пластинами, их толщиной и длиной ребра кубической структуры. Как следует из рис. 2а–с, на разных частотах только пластины в теневой части частицы-линзы вносят вклад в формирование акустической струи, когда течение между пластинами выходит в ее теневой части и интерферирует с рассеянным на внешней поверхности частице-линзе полем. Потенциально, возможна комбинация полностью непрозрачной для излучения частицы-линзы с пластинчатой структурой в ее теневой части. В данном случае линза была спроектирована из эквидистантных V-образных пластин, расположенных по

всему объему линзы для простоты и технологичности ее изготовления.

На рисунке S1 (в дополнительных материалах) показано распределение относительной интенсивности звукового поля для рассматриваемой структуры для трех нескольких углов наклона пластин: 60, 61, 63, 64 градусов соответственно. Анализ проведенного моделирования показал, что при наклоне пластин около 60 градусов область локализации поля в теневой части частицы-линзы практически совпадает с ее теневой поверхностью – формируется своеобразная “горячая точка”. При угле наклона пластин, равного 61 градусу (рис. S1b), положение фокуса (области с максимальной относительной интенсивностью вдоль распространения волны) составляет уже около 100 мм, а при дальнейшем увеличении угла наклона пластин до 64 градусов от смещается “вправо” до значения около 120 мм.

Следует обратить внимание на распределение относительной интенсивности звукового поля вдоль боковой (например, верхней на рисунках S1) грани частицы-линзы. На формирование области локализации поля (фокуса) играет роль более равномерное распределение интенсивности поля вдоль боковой грани структуры – при увеличении угла наклона пластин от 60 до 62...64 градусов интенсивность поля вдоль боковой грани становится более равномерным с небольшим увеличением амплитуды к теневой границе частицы. Отметим, что подробное рассмотрение структуры волн и соответствующих эффектов внутри Янус-линзы выходит за рамки настоящей статьи и будет рассмотрено в отдельной публикации.

Для анализа фокусирующих свойств частицы-линзы целесообразно использовать среднее по времени значение плотности интенсивности потока звукового поля за частицей-линзой  $\mathbf{I} = p\mathbf{v}$ , нормированное на интенсивность плоской волны [37, 38]. Фокусирующее действие частицы-линзы обусловлено потоком звукового поля в каналах между пластинами преимущественно в ее теневой части. На рисунке S2 (дополнительные материалы) показан поток нормированной интенсивности через и в окрестности частицы-линзы для частот облучающей волны 4800, 4900 и 5100 Гц соответственно. Видно, что отраженная от лицевой поверхности волна интерферирует с падающей волной и формирует области течения вдоль боковых граней структуры, которые в условиях волноводных резонансов в зазорах между пластинами S2b формируют сходящийся к оси поток, который в свою очередь и формирует область фокусировки (акустической струи). Сравнение рис. S2a и S2b показывает, что на частоте 4900 Гц поток через

зазор между пластинами в теневой части частицы-линзы более интенсивен, поэтому и область фокусировки (локализации поля) четко выражена.

На частоте 5000 Гц, когда наблюдается хорошо сформированная область локализации звукового поля в теневой части линзы (рис. 2b), распределение потока вдоль боковой грани линзы способствует образованию течения между пластинами вдоль каналов линзы в ее теневой части и выхода этого течения в осевом направлении. Конструктивная интерференция рассеянного на линзе поля с локализованным осевым потоком в ее теневой части приводит к формированию акустической струи [8, 33, 35, 36]. Этот механизм в какой-то мере аналогичен механизму формирования фотонной струи в оптике за счет оптимизации тангенциальной компоненты электрического поля вдоль боковых граней кубической структуры [39]. Отражение от лицевой поверхности частицы-линзы и обусловленное этим отражением структура потока энергии вдоль боковых граней естественно меняются из-за разного эффективного размера зазора и толщины пластин на разных частотах. Из рис. 2 и S2b следует, что усиление рассматриваемой частицы-линзы на частоте около 5000 Гц составляет примерно 4 по интенсивности, нормированной на интенсивность падающей волны.

Параметры области фокусировки звуковой волны (характеристики акустической струи) демонстрируются на рис. 3, где представлены результаты моделирования и соответствующего эксперимента, выполненного на частоте 5000 Гц. Из экспериментальных данных рис. 3a следует, что в продольном направлении (в направлении распространения плоской падающей волны) длина акустической струи составляет около 132 мм или  $1.9\lambda$  (двумерное моделирование предсказывает значение  $2.4\lambda$ ). Отсчет координаты на рис. 3a ведется от теневой поверхности линзы. При этом поперечные размеры области локализации звукового поля (разрешающая способность), в плоскости, проходящей через точку максимальной интенсивности вдоль акустической струи ( $Z = 65$  мм), характеризуются рис. 3b. Из этого рисунка следует, что на частоте 5000 Гц поперечный размер области локализации акустического поля составляет примерно 31 мм или  $0.45\lambda$  (по двумерной симуляции –  $0.54\lambda$ ) и близко к дифракционному пределу.

Заметим, что эксперимент показал несколько большую интенсивность поля в области акустической струи при меньших размерах соответствующих распределений вдоль и поперек акустической струи. Это обусловлено тем [40], что при моделировании использовалась двумерная постановка задачи, в то вре-



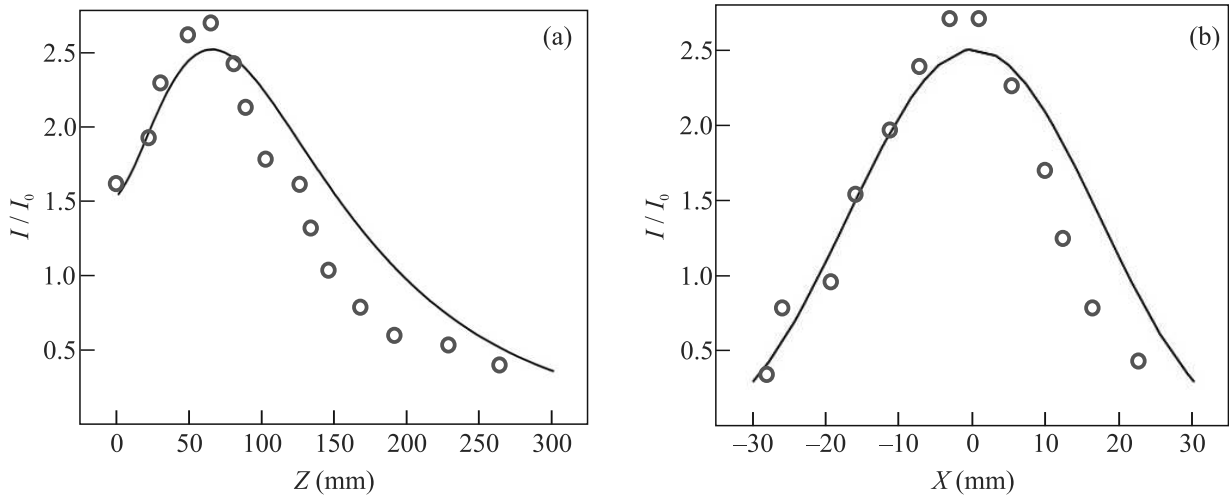


Рис. 3. (Цветной онлайн) Распределение относительной интенсивности звукового поля вдоль (а) и поперек (б) акустической струи. Сплошная линия – моделирование, красные кружки – эксперимент

мя как в эксперименте измерялись характеристики трехмерной кубической Янус-линзы.

Отметим, что проведенное моделирование показало, что, например, для линзы с  $\alpha = 60^\circ$  в непосредственной близости структуры возможно достичь суперразрешения около  $0.16\lambda$ , но уже на расстоянии около 12 мм от теневой поверхности линзы ширина распределения интенсивности звукового поля увеличивается до  $0.43\lambda$ .

**Заключение.** Таким образом, была предложена, спроектирована и изготовлена новая мезоразмерная акустическая трехмерная кубическая Янус-линза с плоскими поверхностями на основе внутренней двумерной V-образной пластинчатой структуры. Моделирование и эксперимент хорошо согласуются между собой, демонстрируя дифракционно-ограниченный эффект звуковой фокусировки с анизотропными свойствами. Трехмерный эффект фокусировки обусловлен внешней трехмерной формой кубической линзы, состоящей из двумерной V-образной структуры, аналогично [8]. При переходе к ультразвуковому диапазону, следует ожидать усиления интенсивности фокусировки в воде.

Достоинством предлагаемой линзы является независимость ее свойств от параметров окружающей среды, так как материал окружающей среды находится в структуре линзы, а ее относительный показатель преломления зависит только от физической длины параллельных пластин или от угла наклона этих пластин по отношению к направлению падающего излучения. Данная акустическая частица-линза может применяться для субволновой фокусировки акустических волн, как в газах, так и

жидкостях. По сравнению с газонаполненными акустическими линзами предлагаемая линза обладает достаточной прочностью и надежностью.

Хотя описанный в этой работе метод демонстрирует возможность фокусировки звука, например, для звуковой сушки материалов, контроля уровня шума, акустической термографии или новых звукофокусирующих систем, он также представляет интерес в ультразвуковом диапазоне [41, 42], например, для биомедицинских приложений, неразрушающего контроля, спектроскопии, акустической левитации частиц и манипуляций с ними, визуализации и т.п.

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда # 21-79-00083 и поддержан программой развития ТПУ.

Авторы благодарят проф. Ной Джименес (Noé Jiménez) за конструктивное обсуждение принципа взаимности и асимметричной фокусировки рассматриваемой Янус линзы.

1. C. Sondhauss, Ann. Physik Chemie. **85**, 378 (1852).
2. Lord Rayleigh. Proc. London Math. Soc. **S1-17**(1), 4 (1855).
3. B. Hadimioglu, E. G. Rawson, R. Lujan, M. Lim, J. C. Zesch, T. Khuri-Yakub, and C. F. Quate, *Proceedings IEEE Ultrasonics Symposium, Baltimore, MD, USA* (1993), v. 1, p. 579; doi: 10.1109/ULTSYM.1993.339544.
4. D. Tarrazó-Serrano, S. Pérez-López, P. Candelas, A. Uris, and C. Rubio, Sci. Rep. **9**, 7067 (2019).
5. T. Miyashita, R. Taniguchi, and H. Sakamoto, *Proceedings of the 5th World Congress on Ultrasonics. Paper # TO-PM04.02.*, Paris, France (2003), p. 911.

6. O. A. Kaya, A. Cicek, and B. Ulug, *Acoust. Phys.* **57**, 292 (2011).
7. M. Dubois, J. Perchoux, A.L. Vanel, C. Tronche, Y. Achaoui, G. Dupont, K. Bertling, A.D. Rakic, T. Antonakakis, S. Enoch, R. Abdeddaim, R.V. Craster, and S. Guenneau, *Phys. Rev. B* **99**, 100301(R) (2019).
8. S. Castiñeira-Ibañez, D. Tarrazo-Serrano, P. Candelas, O.V. Minin, C. Rubio, and I.V. Minin, *Results in Physics* **15**, 102582 (2019).
9. Y. Li, G. Yu, B. Liang, X. Zou, G. Li, and S. Cheng, *Sci. Rep.* **4**, 6830 (2014).
10. X. Yang, J. Yin, G. Yu, L. Peng, and N. Wang, *Appl. Phys. Lett.* **107**, 193505 (2015).
11. V. Romero-Garcia, A. Cebrecos, R. Picó, V.J. Sánchez-Morcillo, L.M. Garcia-Raffi, and J.V. Sánchez-Pérez, *Appl. Phys. Lett.* **103**, 264106 (2013).
12. C. Lu, R. Yu, Q. Ma, K. Wang, J. Wang, and D. Wu, *Appl. Phys. Lett.* **118**, 144103 (2021).
13. H. Kruglak and C. C. Kruse, *Am. J. Phys.* **8**, 260 (1940).
14. J. M. Kendall, *NASA Tech Briefs* **5**, 345 (1980).
15. D. C. Thomas, K. L. Gee, and R. S. Turley, *Am. J. Phys.* **77**, 197 (2009).
16. C. Rubio, D. Tarrazo-Serrano, O. V. Minin, A. Uris, and I. V. Minin, *Results in Physics* **12**, 1905 (2019).
17. C. Rubio, D. Tarrazo-Serrano, O. V. Minin, A. Uris, and I. V. Minin, *EPL* **123**, 64002 (2018).
18. L. Sanchis, A. Yanez, P.L. Galindo, J. Pizarro, and J.M. Pastor, *Appl. Phys. Lett.* **97**, 054103 (2010).
19. А. Р. Бекиров, Б. С. Лукьянчук, А. А. Федянин, *Письма в ЖЭТФ* **112**(6), 361 (2020).
20. O. V. Minin and I. V. Minin, *Opt. Quantum Electron.* **49**, 54 (2017).
21. I. V. Minin and O. V. Minin, *MATEC* **155**, 01029 (2018).
22. I. V. Minin and O. V. Minin, *Diffractive optics and nanophotonics: resolution below the diffraction limit*, Springer, N.Y. (2016).
23. W.E. Kock and F.K. Harvey, *J. Acoust. Soc. Am.* **21**(5), 471 (1949).
24. W.E. Kock, Sound wave refractor. Patent US 2684724A (1948).
25. G.L. Augspurger, *Electronics World* (1962), p. 52.
26. K. Tang, C. Qiu, J. Lu, M. Ke, and Z. Liu, *J. Appl. Phys.* **117**, 024503 (2015).
27. C. Casagrande, M. Veyssie, and C.R. Acad. Sci.(Paris) **306**(11), 1423 (1988).
28. COMSOL Multiphysics. Comsol multiphysics user guide (version 4.3a). COMSOL, AB (2012), p. 3940.
29. M. Sinha and D.J. Buckley, in: *Physical Properties of Polymers Handbook*, Springer, N.Y., NY (2007); [https://doi.org/10.1007/978-0-387-69002-5\\_60](https://doi.org/10.1007/978-0-387-69002-5_60).
30. H.W. Gao, K.I. Mishra, A. Winters, S. Wolin, and D.G. Grier, *Rev. Sci. Instrum.* **89**, 114901 (2018).
31. М. Дж. Крокер, Дж. П. Арена, *Акустический журнал* **49**(2), 199 (2003).
32. I. V. Minin and O. V. Minin, *Photonics* **9**, 762 (2022).
33. J.H. Lopes, M.A.B. Andrade, J.P. Leão-Neto, J.C. Adamowski, I.V. Minin, and G.T. Silva, *Phys. Rev. Appl.* **8**, 024013 (2017).
34. B. S. Luk'yanchuk, A. Bekirov, Z. Wang, I. V. Minin, O. V. Minin, and A. Fedyanin, *Physics of Wave Phenomena* **30**(4), 217 (2022).
35. L. Zhao, T. Horiuchi, and M. Yu, *JASA Express Letters* **1**, 114001 (2021).
36. D. Tarrazo-Serrano, C. Rubio, O. V. Minin, A. Uris, and I. V. Minin, *Ultrasonics* **106**, 106143 (2020).
37. A. D. Pierce, in: *Springer Handbook of Acoustics*, ed. by T. D. Rossing, Springer Science + Business Media, N.Y. (2007), ch. 3, p. 29.
38. О. Э. Гулин, *Акустический журнал* **30**(4), 460 (1984).
39. C.-Y. Liu, W.-Y. Chen, Y. E. Geints, O. V. Minin, and I. V. Minin, *Opt. Lett.* **46**(17), 4292 (2021).
40. Y. Geints, O. V. Minin, and I. V. Minin, *J. Opt.* **20**, 065606 (2018).
41. E. Lampsijärvi, I. V. Minin, O. V. Minin, J. Makinen, R. Wikstedt, E. Hæggström, and A. Salmi, *Proc. 2022 IEEE International Ultrasonics Symposium (IUS), October 10–13, Venice, Italy* (2022), p. 1; doi: 10.1109/IUS54386.2022.9957567.
42. Е. Г. Домбругова, Н. Н. Чернов, *Письма в ЖТФ* **48**(10), 3 (2022).

# Увеличение эффективности изотопно-селективной лазерной ИК многофотонной диссоциации молекул $^{11}\text{BCl}_3$ в смеси с сенсibilизатором и акцептором радикалов $\text{SF}_6$

Г. Н. Макаров<sup>1)</sup>, А. Н. Петин

Институт спектроскопии РАН, 108840 Троицк, Москва, Россия

Поступила в редакцию 29 марта 2022 г.

После переработки 11 апреля 2023 г.

Принята к публикации 11 апреля 2023 г.

Обнаружено сильное увеличение эффективности изотопно-селективной лазерной ИК многофотонной диссоциации (МФД) молекул  $^{11}\text{BCl}_3$  в естественной смеси с  $^{10}\text{BCl}_3$  излучением импульсного  $\text{CO}_2$ -лазера в случае их облучения с сенсibilизатором – молекулами  $\text{SF}_6$ , которые являются одновременно и акцепторами радикалов – атомов  $\text{Cl}$ , образующихся при диссоциации молекул  $\text{BCl}_3$ . Наблюдалось существенное (в несколько раз) увеличение выхода и селективности диссоциации молекул  $^{11}\text{BCl}_3$ , а также значительное уменьшение пороговой плотности энергии диссоциации молекул в случае их облучения с  $\text{SF}_6$  по сравнению со случаем облучения без  $\text{SF}_6$ . Это открывает возможность реализации одночастотной изотопно-селективной диссоциации молекул  $^{11}\text{BCl}_3$  несфокусированным лазерным излучением при умеренной ( $\approx 3\text{--}5 \text{ Дж/см}^2$ ) плотности энергии возбуждения, что важно и актуально в плане практической реализации лазерного метода для разделения изотопов бора.

DOI: 10.31857/S123456782310004X, EDN: clczlz

**1. Введение.** В последнее время возрос интерес к лазерному разделению изотопов бора [1–4]. Это связано с их применением в важных отраслях промышленности, в медицине [5–7], а также в космических экспериментах [8]. В природе бор содержится в виде двух изотопных модификаций –  $^{10}\text{B}$  (около 19.8%) и  $^{11}\text{B}$  (около 80.2%) [5, 6].  $^{10}\text{B}$  имеет очень большое сечение захвата тепловых нейтронов, около 3837 барн [9] (1 барн равен  $10^{-24} \text{ см}^2$ ). Для большинства нуклидов это сечение близко к единицам или долям барна. Поэтому материалы, обогащенные изотопом  $^{10}\text{B}$  (борная кислота, карбид бора и другие соединения) широко применяются в атомной энергетике. Изотоп  $^{11}\text{B}$  используется в электронной промышленности как легирующий компонент при производстве полупроводниковых изделий [6, 7]. В связи с этим разработка методов и эффективной технологии разделения изотопов бора являются важной и актуальной задачей.

Наиболее эффективным методом молекулярного лазерного разделения изотопов сегодня считается метод селективной инфракрасной (ИК) многофотонной диссоциации молекул излучением импульсно-периодического  $\text{CO}_2$ -лазера [10, 11]. Поэтому при реализации технологического процесса разделения изотопов бора целесообразно использовать именно этот

метод. Он успешно применялся ранее в технологии лазерного разделения изотопов углерода на практике [12, 13].

Для молекулярного лазерного разделения изотопов с использованием имеющихся эффективных импульсных  $\text{CO}_2$ -лазеров необходимо, чтобы полосы ИК поглощения выбранных молекул попадали в диапазон генерации  $\text{CO}_2$ -лазера и обладали сравнительно большим ( $\geq 5\text{--}10 \text{ см}^{-1}$ ) изотопическим сдвигом. Кроме того, желательно, чтобы эффективная изотопно-селективная диссоциация выбранных молекул осуществлялась при невысокой плотности энергии лазерного излучения.

Одним из наиболее подходящих исходных соединений для лазерного разделения изотопов бора является газообразное химическое соединение  $\text{BCl}_3$ . Полосы ИК поглощения колебаний  $\nu_3$  молекул  $^{11}\text{BCl}_3$  ( $\approx 954.2 \text{ см}^{-1}$ ) и  $^{10}\text{BCl}_3$  ( $\approx 993.7 \text{ см}^{-1}$ ) [14] попадают в резонанс соответственно с Р- и R-ветвями 10.6 мкм полосы генерации  $\text{CO}_2$ -лазера. Изотопический сдвиг между указанными полосами ИК поглощения молекул  $^{11}\text{BCl}_3$  и  $^{10}\text{BCl}_3$  составляет  $\Delta\nu_{\text{is}} \approx 39.5 \text{ см}^{-1}$  [14]. Именно с использованием  $\text{BCl}_3$  была впервые продемонстрирована изотопно-селективная лазерная ИК МФД молекул [15]. В большом числе последующих работ [16–26] была довольно детально изучена изотопно-селективная диссоциация молекул  $\text{BCl}_3$  в поле излучения мощного импульсного  $\text{CO}_2$ -лазера с

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

использованием разных акцепторов радикалов ( $\text{H}_2$ ,  $\text{NO}$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{D}_2\text{S}$ ,  $\text{HBr}$  и др.) для подавления процесса ассоциации образующихся при диссоциации молекул  $\text{BCl}_3$  радикалов  $\text{BCl}_2$  и атомов  $\text{Cl}$  [16].

Установлено, что в плане получения сравнительно высоких значений селективности и выхода диссоциации молекул  $\text{BCl}_3$  довольно хорошим акцептором радикалов является кислород [17–19, 22]. В случае использования кислорода конечными продуктами ИК многофотонной диссоциации молекул  $\text{BCl}_3$  являются  $\text{B}_2\text{O}_3$  и  $\text{Cl}_2$  [17]. Твердое соединение  $\text{B}_2\text{O}_3$  в виде пленки осаждается на стенках и окнах кюветы, в которой облучается газ. Показано [17, 23], что акцепторы радикалов практически не приводят к сколько-нибудь значительному увеличению селективности и выхода диссоциации  $\text{BCl}_3$ , а также уменьшению порога диссоциации молекул.

В ходе выполненных ранее исследований установлено также, что для эффективной ИК многофотонной диссоциации молекул  $\text{BCl}_3$  требуются довольно высокие плотности энергии возбуждающего лазерного излучения ( $\Phi \geq 20 \text{ Дж/см}^2$ ) [23, 24], что связано, главным образом, с большой энергией связи молекулы ( $\approx 110 \text{ ккал/моль}$  [27]). Поэтому ИК диссоциация молекул возможна только сфокусированными лазерными пучками. Вместе с тем использование сфокусированных лазерных пучков приводит, как правило, к уменьшению изотопической селективности процесса диссоциации молекул [10, 11].

В случае возбуждения молекул  $\text{BCl}_3$  одночастотным лазерным излучением селективности диссоциации молекул  $^{10}\text{BCl}_3$  и  $^{11}\text{BCl}_3$  составляли соответственно  $\alpha(^{10}\text{B}/^{11}\text{B}) \leq 8$  и  $\alpha(^{11}\text{B}/^{10}\text{B}) \leq 2.5$  [22–24]. При этом выходы диссоциации молекул (в пересчете на облучаемый лазером объем газа в кювете) были небольшими ( $\beta_{10} \approx \beta_{11} \leq (2-8) \times 10^{-4}$  [24]). Значительно более высокие селективности и выходы диссоциации молекул  $\text{BCl}_3$  ( $\alpha(^{10}\text{B}/^{11}\text{B}) \geq 8$ ;  $\beta_{10} \geq 10\%$ ;  $\beta_{11} \geq 20\%$ ) наблюдались в случае их возбуждения двухчастотным ИК лазерным излучением [28, 29]. При этом существенно уменьшался также порог диссоциации молекул (до значений  $\Phi_1$  и  $\Phi_2 \geq 2-3 \text{ Дж/см}^2$ ). Однако реализация технологического процесса лазерного разделения изотопов бора с использованием двухчастотной диссоциации молекул представляется весьма сложной на практике.

В данной работе нами обнаружено, что в случае использования при изотопно-селективной лазерной ИК многофотонной диссоциации  $\text{BCl}_3$  в качестве сенсibilизатора и акцептора радикалов молекул  $\text{SF}_6$  происходит существенное увеличение эффективности диссоциации молекул  $^{11}\text{BCl}_3$ . Это пред-

ставляется весьма важным и актуальным при реализации технологического процесса лазерного разделения изотопов бора.

**2. Эксперимент.** Экспериментальная установка (рис. 1) включала в себя перестраиваемый по час-

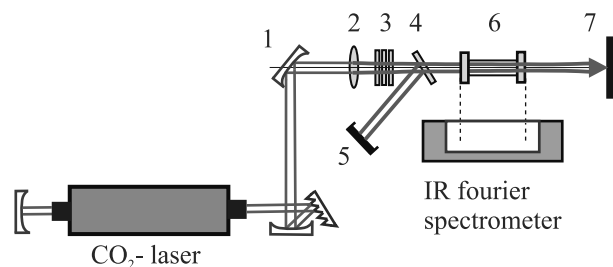


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема экспериментальной установки. 1 – зеркало; 2 – длиннофокусная линза; 3 – ослабитель лазерного излучения; 4 – делительная пластинка; 5 – приемник излучения; 6 – кювета с облучаемым газом; 7 – поглотитель излучения

тоте импульсный  $\text{CO}_2$ -лазер, формирующую оптику, газовую кювету из нержавеющей стали для облучения исследуемых молекул длиной 112 мм, объемом  $24.2 \text{ см}^3$ , с окнами из  $\text{BaF}_2$ , calorиметрический (ТПИ-2-5) и пирозлектрический (SensorPhysics Model 510) приемники излучения для измерения падающей и прошедшей через кювету энергии. Импульс излучения  $\text{CO}_2$ -лазера состоял из переднего пика длительностью около 80 нс по полувысоте и хвостовой части длительностью  $\approx 750 \text{ нс}$ , в которой содержалась примерно третья часть энергии лазерного импульса. Коллимация лазерного пучка в облучаемую кювету производилась длиннофокусной ( $f = 1 \text{ м}$ ) линзой. Энергия излучения лазера в импульсе составляла от 0.7 до 3.0 Дж, в зависимости от частоты генерации и парциального состава лазерной смеси. Частота излучения лазера перестраивалась в диапазоне 9.2–10.8 мкм. Для привязки частоты линий излучения  $\text{CO}_2$ -лазера использовался оптико-акустический приемник с реперным газом  $\text{NH}_3$ . Поперечное распределение плотности энергии и площадь сечения лазерного пучка определялись с помощью микрозонда путем сканирования его поперек лазерного пучка во взаимно-перпендикулярных направлениях на входе и на выходе из кюветы.

**3. Метод.** Селективная по изотопам бора ИК многофотонная диссоциация молекул  $\text{BCl}_3$  проводилась при настройке частоты излучения  $\text{CO}_2$ -лазера на линию 10P32 (частота  $932.96 \text{ см}^{-1}$ ), которая совпадает с длинноволновым крылом полосы поглощения колебания  $\nu_3$  молекул  $^{11}\text{BCl}_3$  ( $\approx 954.2 \text{ см}^{-1}$  [14]). Полоса поглощения колебания  $\nu_3$  молекул  $\text{SF}_6$

( $\approx 948 \text{ см}^{-1}$  [30]) примерно на  $6.2 \text{ см}^{-1}$  смещена в низкочастотную сторону от центра полосы поглощения молекул  $^{11}\text{BCl}_3$  (рис. 2а-с). При лазерном ИК многофотонном возбуждении полосы поглощения как молекул  $^{11}\text{BCl}_3$ , так и молекул  $\text{SF}_6$  смещаются из-за ангармонизма колебаний в красную сторону (в сторону частоты излучения лазера) и приходят в оптимальный резонанс с лазерным полем [31–34]. Происходит эффективное ИК многофотонное возбуждение обоих типов молекул, в том числе молекул  $\text{SF}_6$ , поглощенная энергия от которых передается молекулам  $^{11}\text{BCl}_3$ . Поскольку полосы поглощения молекул  $\text{SF}_6$  и  $^{11}\text{BCl}_3$  практически совпадают, процесс колебательно-колебательного  $V-V$  обмена энергией между ними имеет резонансный характер и происходит очень эффективно [35, 36]. Это и приводит к увеличению выхода диссоциации молекул  $^{11}\text{BCl}_3$ . Отметим, что поскольку энергия диссоциации молекул  $\text{SF}_6$  ( $\approx 92 \text{ ккал/моль}$  [37]) меньше энергии диссоциации молекул  $\text{BCl}_3$ , при высоких плотностях энергии возбуждения имеет место также диссоциация и молекул  $\text{SF}_6$ .

Фотохимическая реакция при лазерной ИК многофотонной диссоциации молекул  $^{11}\text{BCl}_3$  протекает по схеме



где  $nh\nu$  обозначает количество поглощенных лазерных ИК фотонов.

В результате облучения газа продукты диссоциации обогащались изотопом  $^{11}\text{B}$ , а остаточный газ  $\text{BCl}_3$  обогащался изотопом  $^{10}\text{B}$ . Выходы диссоциации, которые представляют собой доли распавшихся в облучаемом объеме молекул за один лазерный импульс, определялись по изменениям в ИК спектрах поглощения для каждой из изотопных компонент  $\text{BCl}_3$ .

Спектры поглощения измерялись с помощью ИК фурье-спектрометра ФТ-801. Выходы диссоциации  $\beta_{11}$  и  $\beta_{10}$  вычислялись по парциальному давлению каждой компоненты  $^i\text{BCl}_3$  ( $i = 10, 11$ ) до ( $p_{i,0}$ ) и после ( $p_i$ ) облучения лазерными импульсами с использованием соотношения

$$\beta_i = \Gamma^{-1} [1 - (p_i/p_{i,0})^{1/N}], \quad (2)$$

где  $\Gamma \approx 0.083$  – отношение облучаемого объема ( $V_{\text{игт}} \approx 2.0 \text{ см}^3$ ) к объему кюветы ( $V_{\text{cell}} = 24.2 \text{ см}^3$ ),  $N$  – число импульсов облучения. Измерения интенсивности полосы поглощения молекул  $^{11}\text{BCl}_3$  до и после облучения проводились на частоте  $\approx 954.2 \text{ см}^{-1}$  (примерно в максимуме полосы поглощения  $^{11}\text{BCl}_3$ ), на которой практически никакого вклада от погло-

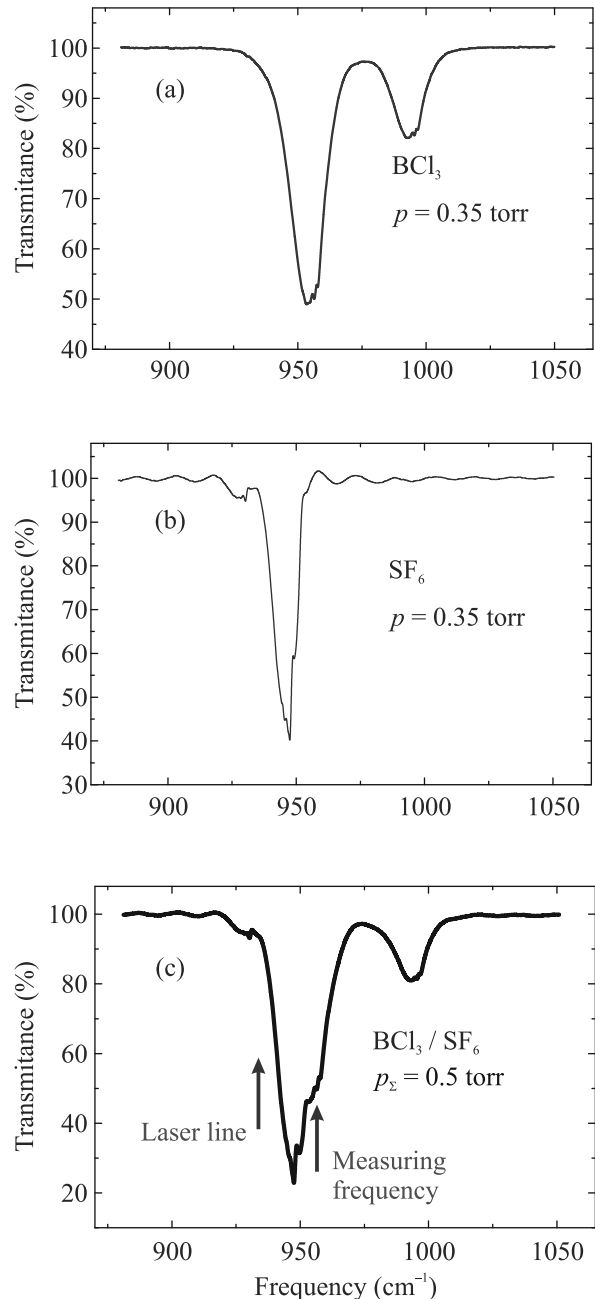


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Полосы ИК поглощения колебаний  $\nu_3$  молекул  $^{11}\text{BCl}_3$  и  $^{10}\text{BCl}_3$ . Давление  $\text{BCl}_3$  в кювете 0.35 торр, длина кюветы 11.2 см. (б) – Полоса ИК поглощения колебания  $\nu_3$  молекул  $\text{SF}_6$ . Давление  $\text{SF}_6$  в кювете 0.15 торр. (с) – Полосы ИК поглощения колебаний  $\nu_3$  молекул  $^{11}\text{BCl}_3$ ,  $^{10}\text{BCl}_3$  и  $\text{SF}_6$ . Давление  $\text{BCl}_3$  в кювете 0.35 торр,  $\text{SF}_6$  – 0.15 торр

щения молекул  $\text{SF}_6$  при используемых в эксперименте давлениях не было (см. рис. 2б). Селективность  $\alpha(^{11}\text{B}/^{10}\text{B})$  определялась как отношение выходов диссоциации молекул  $^{11}\text{BCl}_3$  и  $^{10}\text{BCl}_3$

$$\alpha(^{11}\text{B}/^{10}\text{B}) = \beta_{11}/\beta_{10}. \quad (3)$$

**4. Результаты и их обсуждение.** В экспериментах измерялись основные параметры селективной лазерной ИК многофотонной диссоциации молекул  $\text{BCl}_3$  – выходы диссоциации молекул  $^{11}\text{BCl}_3$  ( $\beta_{11}$ ) и  $^{10}\text{BCl}_3$  ( $\beta_{10}$ ), а также селективность диссоциации молекул  $^{11}\text{BCl}_3$  по отношению к молекулам  $^{10}\text{BCl}_3$  ( $\alpha(^{11}\text{B}/^{10}\text{B})$ ). Получены зависимости этих параметров от давлений облучаемых газов  $\text{BCl}_3$  и  $\text{SF}_6$ , а также от плотности энергии возбуждающего лазерного излучения.

На рисунке 3 показаны полосы ИК поглощения колебаний  $\nu_3$  молекул  $^{11}\text{BCl}_3$ ,  $^{10}\text{BCl}_3$  и молекул  $\text{SF}_6$  до облучения (1) и после облучения лазером (2). Показаны также полосы ИК поглощения колебаний  $\nu_1$  ( $\approx 851.4 \text{ см}^{-1}$ ) и  $\nu_8$  ( $\approx 909.1 \text{ см}^{-1}$ ) образующегося продукта  $\text{SF}_5\text{Cl}$  [38]. Исходное давление  $\text{BCl}_3$  в кювете 0.35 торр,  $\text{SF}_6$  – 0.15 торр. Плотность энергии возбуждающего лазерного излучения  $1.91 \text{ Дж/см}^2$ . Число импульсов облучения  $N = 1800$ . Кроме  $\text{SF}_5\text{Cl}$ , в образующихся продуктах нами были обнаружены также (спектры ИК поглощения других продуктов на рис. 3 не показаны) молекулы  $\text{BCl}_2\text{F}$ ,  $\text{BClF}_2$  и  $\text{BF}_3$ .

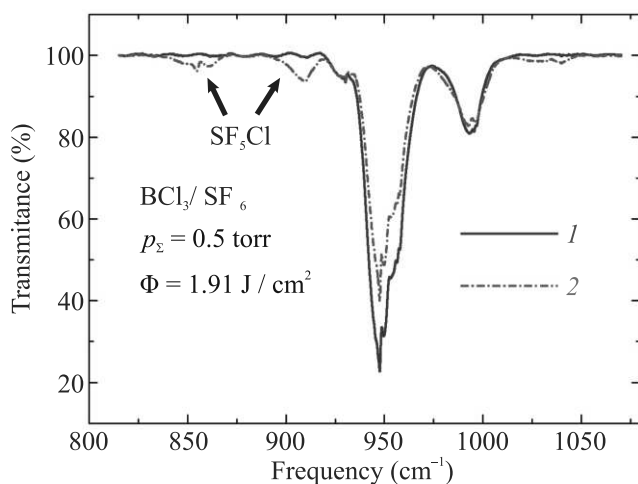


Рис. 3. (Цветной онлайн) Полосы ИК поглощения колебаний  $\nu_3$  молекул  $^{11}\text{BCl}_3$ ,  $^{10}\text{BCl}_3$  и молекул  $\text{SF}_6$  до облучения (1) и после облучения (2) лазером. Показаны также полосы ИК поглощения образующегося продукта  $\text{SF}_5\text{Cl}$  с центрами полос на частотах  $851.4 \text{ см}^{-1}$  (колебание  $\nu_1$ ) и  $909.1 \text{ см}^{-1}$  (колебание  $\nu_8$ ) [38]. Исходное давление  $\text{BCl}_3$  в кювете 0.35 торр,  $\text{SF}_6$  – 0.15 торр. Плотность энергии возбуждающего лазерного излучения  $1.91 \text{ Дж/см}^2$ . Число импульсов облучения  $N = 1800$

На рисунке 4а, б показаны зависимости выходов диссоциации молекул  $^{11}\text{BCl}_3$   $\beta_{11}$  и  $^{10}\text{BCl}_3$   $\beta_{10}$  (а), а также селективности диссоциации молекул  $^{11}\text{BCl}_3$  по отношению к молекулам  $^{10}\text{BCl}_3$   $\alpha(^{11}\text{B}/^{10}\text{B})$  (б) от

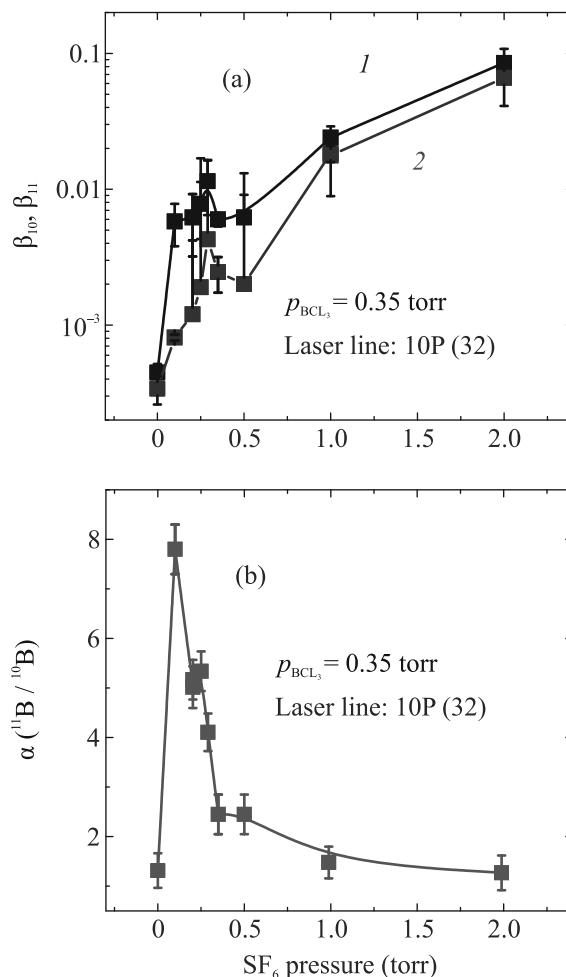


Рис. 4. (Цветной онлайн) (а), (б) – Зависимости выходов диссоциации  $\beta_{11}$  (кривая 1) и  $\beta_{10}$  (кривая 2) (а), а также селективности диссоциации  $\alpha(^{11}\text{B}/^{10}\text{B})$  (б) от давления  $\text{SF}_6$  при фиксированном давлении  $\text{BCl}_3$ , равном 0.35 торр, и плотности энергии возбуждающего излучения  $2.1 \text{ Дж/см}^2$

давления  $\text{SF}_6$  в диапазоне 0.05–2.0 торр при фиксированном давлении  $\text{BCl}_3$ , равном 0.35 торр, и плотности энергии возбуждающего излучения  $\Phi \approx 2.1 \text{ Дж/см}^2$ . Видно, что в исследуемом диапазоне давлений  $\text{SF}_6$  выходы диссоциации молекул  $^{11}\text{BCl}_3$  и  $^{10}\text{BCl}_3$  растут соответственно от значений  $\beta_{11} \approx 4.5 \times 10^{-4}$  и  $\beta_{10} \approx 3.4 \times 10^{-4}$  при облучении молекул  $\text{BCl}_3$  без  $\text{SF}_6$  до значений  $\beta_{11} \approx 8.5 \times 10^{-2}$  и  $\beta_{10} \approx 7.2 \times 10^{-2}$  в случае облучения молекул  $\text{BCl}_3$  с  $\text{SF}_6$  при давлении 2.0 торр.

Таким образом, при облучении молекул  $\text{BCl}_3$  с  $\text{SF}_6$  наблюдается увеличение выходов диссоциации молекул  $\text{BCl}_3$  более чем на два порядка. Отметим резкое увеличение (более чем на порядок) выхода диссоциации молекул  $^{11}\text{BCl}_3$  при добавлении все-

го лишь 0.1 торр  $\text{SF}_6$ . Это означает также, что за счет использования  $\text{SF}_6$  значительно уменьшается пороговая плотность энергии диссоциации молекул  $^{11}\text{BCl}_3$ . Рост выходов диссоциации молекул  $^{11}\text{BCl}_3$  и  $^{10}\text{BCl}_3$  с увеличением давления  $\text{SF}_6$  в области  $\approx 0.5$ –2.0 торр носит монотонный характер.

Селективность диссоциации молекул  $^{11}\text{BCl}_3$  по отношению к молекулам  $^{10}\text{BCl}_3$  резко растет от значения  $\alpha(^{11}\text{B}/^{10}\text{B}) \approx 1.3$  в случае облучения молекул без  $\text{SF}_6$  до величины  $\alpha(^{11}\text{B}/^{10}\text{B}) \approx 8.0$  в случае облучения молекул с  $\text{SF}_6$  при давлении  $\approx 0.15$ –0.2 торр. При дальнейшем увеличении давления  $\text{SF}_6$  до  $\approx 0.4$  торр селективность быстро падает до значения  $\alpha(^{11}\text{B}/^{10}\text{B}) \approx 3.0$  и далее медленно уменьшается до величины  $\alpha(^{11}\text{B}/^{10}\text{B}) \approx 1.0$  при давлении  $\text{SF}_6 \geq 1.5$  торр. Таким образом, в случае облучения  $\text{BCl}_3$  при давлении 0.35 торр с  $\text{SF}_6$  максимальные значения селективности диссоциации  $\alpha(^{11}\text{B}/^{10}\text{B})$  достигаются при давлении  $\text{SF}_6$  в диапазоне 0.15–0.25 торр. При этом селективность  $\alpha(^{11}\text{B}/^{10}\text{B})$  в случае облучения с  $\text{SF}_6$  более чем в 3–5 раз больше, чем при облучении молекул  $\text{BCl}_3$  без  $\text{SF}_6$ .

На рисунке 5 приведены зависимости выходов диссоциации молекул  $^{11}\text{BCl}_3$  и  $^{10}\text{BCl}_3$ , а также селективности диссоциации  $\alpha(^{11}\text{B}/^{10}\text{B})$  от плотности энергии возбуждающего лазерного излучения в диапазоне от  $\approx 1.8$  до  $3.4$  Дж/см<sup>2</sup>. Облучалась смесь молекул 0.35 торр  $\text{BCl}_3$  + 0.1 торр  $\text{SF}_6$ . Видно, что выходы диссоциации молекул  $\text{BCl}_3$  быстро растут с увеличением плотности энергии возбуждения. Столь быстрый рост выходов диссоциации объясняется тем, что вследствие большой энергии связи молекул  $\text{BCl}_3$  при указанных плотностях энергии лазерного излучения процесс ИК диссоциации носит надпороговый характер и сравнительно далек от насыщения.

Селективность диссоциации молекул  $^{11}\text{BCl}_3$   $\alpha(^{11}\text{B}/^{10}\text{B})$ , наоборот, резко падает с увеличением плотности энергии возбуждения. Вместе с тем при всех исследуемых плотностях энергии возбуждения селективность диссоциации с использованием  $\text{SF}_6$  значительно (в 2–5 раз) больше, чем без  $\text{SF}_6$ . Наблюдаемое поведение зависимостей выходов диссоциации и селективности от плотности энергии возбуждающего излучения характерно для процесса изотопно-селективной лазерной ИК многофотонной диссоциации большого числа молекул [10, 11]

**5. Заключение.** Обнаружено существенное увеличение эффективности изотопно-селективной лазерной ИК МФД молекул  $^{11}\text{BCl}_3$  в естественной смеси с  $^{10}\text{BCl}_3$  в случае их облучения с резонансно поглощающим излучением лазера сенсibilизатором и акцентором радикалов  $\text{SF}_6$ . Показано, что при об-

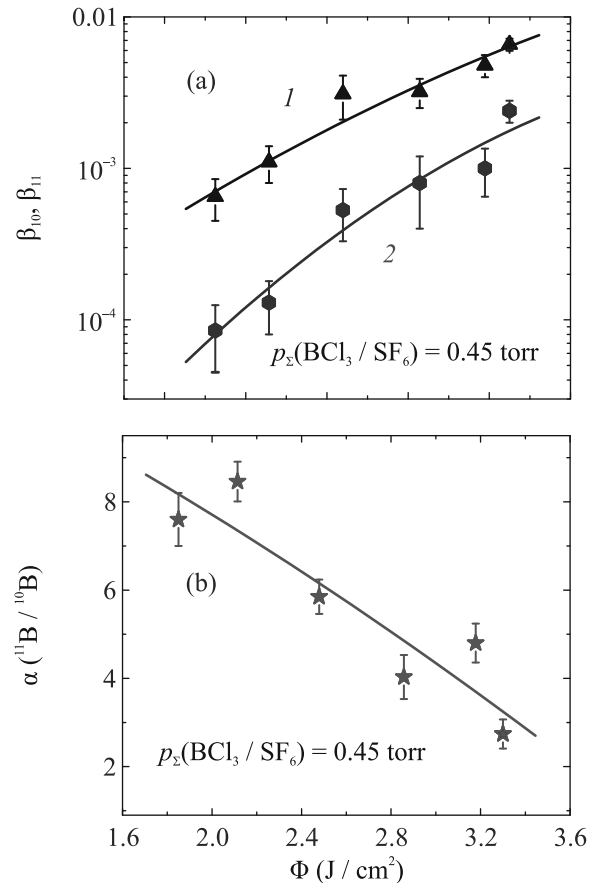


Рис. 5. (Цветной онлайн) (а), (б) – Зависимости выходов диссоциации  $\beta_{11}$  (кривая 1) и  $\beta_{10}$  (кривая 2) (а), а также селективности диссоциации  $\alpha(^{11}\text{B}/^{10}\text{B})$  (б) от плотности энергии возбуждающего лазерного излучения. Давление газа в кювете: 0.35 торр  $\text{BCl}_3$  + 0.1 торр  $\text{SF}_6$

лучении  $\text{BCl}_3$  в смеси с  $\text{SF}_6$  сильно увеличиваются как выход диссоциации молекул  $^{11}\text{BCl}_3$  (на 1–2 порядка), так и селективность диссоциации (в 2–5 раз), а также значительно (примерно на порядок) уменьшается пороговая плотность энергии диссоциации по сравнению со случаем облучения  $\text{BCl}_3$  без  $\text{SF}_6$ . Это открывает возможность реализации одночастотной изотопно-селективной лазерной ИК диссоциации молекул  $^{11}\text{BCl}_3$  в несфокусированных лазерных пучках при умеренной ( $\leq 4$ –5 Дж/см<sup>2</sup>) плотности энергии возбуждения.

Полученные результаты важны и актуальны в плане применения описанного метода для разработки лазерной технологии разделения изотопов бора, поскольку становится возможным получать высокообогащенный изотопом  $^{10}\text{B}$  молекулярный газ  $\text{BCl}_3$  за счет диссоциации молекул  $^{11}\text{BCl}_3$  в природной смеси с  $^{10}\text{BCl}_3$ .

Авторы выражают благодарность Е. А. Рябову за полезные обсуждения.

Работа выполнена в рамках проекта госзадания.

1. J. Guo, Y.-J. Li, J.-P. Ma, X. Tang, X.-S. Liu, *Chem. Phys. Lett.* **773**, 138572 (2021).
2. A. K. A. Lyakhov and A. N. Pechen, *Appl. Phys. B* **126**(8), 141 (2020).
3. A. Aljubouri, F. H. Hamza, and H. H. Mohammed, *Engineering and Technology Journal* **34**(5), Part (B) Scientific, 157 (2016).
4. K. A. Lyakhov, H. J. Lee, and A. N. Pechen, *Separat. Purificat. Technol.* **176**, 402 (2017).
5. С. П. Потапов, *Атомная энергия* **10**, 244 (1961).
6. J. M. Blum and S. Martean, *Energie nucleaire* **14**(1), 33 (1972).
7. А. Ф. Чабак, А. С. Полевой, *Изотопы в реакторостроении*, в кн. *Изотопы: свойства, получение, применение*, под ред. В. Ю. Баранова, Физматлит, М. (2005), т. II, с. 192.
8. Э. А. Богомолов, Г. И. Васильев, В. Менн, *Известия РАН. Серия физическая* **85**(4), 466 (2021).
9. A. A. Palko and J. S. Drury, *Adv. Chem. Ser.* **89**, 40 (1969).
10. V. N. Bagratashvili, V. S. Letokhov, A. A. Makarov, and E. A. Ryabov, *Multiple Photon Infrared Laser Photophysics and Photochemistry*, Harwood Acad. Publ. (1985).
11. *Multiple-Photon Excitation and Dissociation of Polyatomic Molecules*, ed. by C. D. Cantrell, Topics in Current Physics, Springer-Verlag, Berlin (1986), v. 35.
12. В. С. Летохов, Е. А. Рябов, *Многофотонная изотопически-селективная ИК диссоциация молекул*, в кн. *Изотопы: свойства, получение, применение*, под ред. В. Ю. Баранова, Физматлит, М. (2005), т. I, с. 445.
13. V. Yu. Baranov, A. P. Dyadkin, D. D. Malynta, V. A. Kuzmenko, S. V. Pigulsky, V. S. Letokhov, V. B. Laptev, E. A. Ryabov, I. V. Yarovoi, V. B. Zarin, and A. S. Podorashy, *Production of carbon isotopes by laser separation*, Proc. SPIE (Progress in Research and Development of High-Power Industrial CO<sub>2</sub>-lasers), **4165**, 314 (2000).
14. D. F. Wolfe and G. L. Humphrey, *J. Mol. Struct.* **3**, 293 (1969).
15. Р. В. Амбарцумян, В. С. Летохов, Е. А. Рябов, Н. В. Чекалин, *Письма в ЖЭТФ* **20**, 597 (1974).
16. J. L. Lyman and S. D. Rockwood, *J. Appl. Phys.* **47**(2), 595 (1975).
17. Р. В. Амбарцумян, Ю. А. Горохов, В. С. Летохов, Г. Н. Макаров, Е. А. Рябов, Н. В. Чекалин, *Квантовая электроника* **2**, 2197 (1975).
18. Р. В. Амбарцумян, В. С. Должиков, В. С. Летохов, Е. А. Рябов, Н. В. Чекалин, *ЖЭТФ* **69**, 72 (1975).
19. Р. В. Амбарцумян, Ю. А. Горохов, В. С. Летохов, Г. Н. Макаров, Е. А. Рябов, Н. В. Чекалин, *Квантовая электроника* **3**, 802 (1976).
20. C. D. Rockwood, J. W. Hudson, *Chem. Phys. Lett.* **34**, 542 (1975).
21. С. Т. Лин, Т. Д. З. Атварс, and Ф. В. Т. Пессине, *J. Appl. Phys.* **48**, 1720 (1977).
22. Ю. Р. Коломыйский, Е. А. Рябов, *Квантовая электроника* **5**, 651 (1978).
23. Y. Ishikawa, O. Kurihara, R. Nakane, and S. Arai, *Chem. Phys.* **52**, 143 (1980).
24. Z. Peiran, Z. Wensen, and Z. Yuying, *Chinese J. Lasers* **8**(10), 20 (1981).
25. K. Takeuchi, O. Kurihara, and R. Nakane, *Chem. Phys.* **54**, 383 (1981).
26. К.-Н. Lee, Н. Takeo, S. Kondo, C. Matsumura, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **58**, 1772 (1985).
27. В. Н. Кондратьев (ред.), *Энергии разрыва химических связей, потенциалы ионизации и сродство к электрону*, Наука, М. (1974).
28. В. Б. Лаптев, Е. А. Рябов, *Квантовая электроника* **13**, 2368 (1986).
29. В. Б. Лаптев, Е. А. Рябов, *Химическая физика* **7**, 165 (1988).
30. R. S. McDowell, V. J. Krohn, H. Flicker, and M. C. Vasquez, *Spectrochim. Acta* **42A**, 351 (1986).
31. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, *Письма в ЖЭТФ* **112**, 226 (2020).
32. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, *ЖЭТФ* **159**, 281 (2021).
33. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, *Письма в ЖЭТФ* **115**, 292 (2022).
34. В. Б. Лаптев, Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, Е. А. Рябов, *ЖЭТФ* **162**, 60 (2022).
35. R. S. Karve, S. K. Sarkar, K. V. S. Rama Rao, and J. P. Mittal, *Appl. Phys. B* **53**, 108 (1991).
36. В. У. Мохан, *J. Chem. Phys.* **46**, 98 (1967).
37. S. W. Benson, *Chem. Rev.* **78**, 23 (1978).
38. R. E. Nofle, R. R. Smardzewski, and W. B. Fox, *Inorg. Chem.* **16**(12), 3380 (1977).



## Квазикристаллические структуры с узкополосной спектрально-угловой селективностью

В. А. Чистяков<sup>+1)</sup>, М. С. Сидоренко<sup>+</sup>, А. Д. Саянский<sup>+</sup>, М. В. Рыбин<sup>+\*</sup>

<sup>+</sup> Университет ИТМО, Физический факультет, 191002 С.-Петербург, Россия

<sup>\*</sup> Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, 194021 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 22 марта 2023 г.

После переработки 12 апреля 2023 г.

Принята к публикации 17 апреля 2023 г.

Методы дизайна в обратном пространстве позволяют получать структуры с желаемыми свойствами. Мы представляем результаты по разработке квазикристаллических фотонных структур, которые обеспечивают селективное рассеяние электромагнитной волны, падающей на образец. Максимумы Фурье-образа искомого распределения диэлектрической проницаемости в обратном пространстве были расположены вдоль двух дуг на сфере Эвальда, соответствующей рассеянию волны с требуемыми параметрами: длина волны и угол падения. Переход к прямому пространству позволил найти распределение материала. После бинаризации показателя преломления формировалась структура с малым диэлектрическим контрастом. Теоретическое исследование свойств полученной структуры подтвердило спектрально-угловую селективность рассеяния. Результаты численных расчетов показывают возможность получения эффективного рассеяния и поглощения электромагнитной энергии до 94 % в узкой полосе частот и для узкого диапазона углов падения при диэлектрическом контрасте двух материалов 1.07.

DOI: 10.31857/S1234567823100051, EDN: cllimc

За последние десятилетия широкое распространение получили фотонные кристаллы (ФК) [1–3] и другие резонансные структуры [4–6], обеспечивающие возможность управления электромагнитным излучением. Ключевым свойством ФК является существование полосы запрещенных частот, возникающей вследствие брэгговского рассеяния на кристаллических слоях в структурах с периодически меняющимися показателями преломления. Однако периодичность фотонного кристалла ограничивает количество возможных симметрий, образующих фиксированное число возможных пространственных групп.

К настоящему времени методы разработки фотонных структур претерпели смену парадигмы от интуитивных методов проектирования к методам обратного дизайна с использованием численной оптимизации, включая искусственный интеллект [7–11]. Эти методы приводят к сложному распределению материала по пространству, однако такие структуры обладают требуемой функциональностью. Благодаря достижениям цифровых аддитивных технологий было продемонстрировано множество фотонных структур, использующих более сложную структуру по сравнению с ФК: гиперпериодические структу-

ры [12, 13], квазикристаллы [14], муаровые решетки [15] и поверхности Фурье [16].

Недавно в работе [17] на основе метода дизайна в обратном пространстве была продемонстрирована квазикристаллическая структура, обладающая полной запрещенной зоной при малом диэлектрическом контрасте, которого можно достичь, используя полимерные материалы. В прямом пространстве такие структуры соответствуют наложению множества решеток с равномерным распределением ориентаций в полном телесном угле  $4\pi$ . Для двумерного случая было продемонстрировано, что отсутствие трансляционной симметрии у упорядоченных квазикристаллических структур не сказывается на величине модуляции локальной плотности состояний электромагнитного поля [18]. Кроме этого, интерес представляют исследования локализации волн в аперiodических системах [19–23]. В случае неупорядоченных структур одним из наиболее интригующих свойств является эффект андерсоновской локализации [24], который наблюдался во множестве структур [25, 26]. Также в недавней работе было продемонстрировано экспериментальное наблюдение внутренней локализации света в 3D икосаэдрическом квазикристалле [14]. В аперiodических структурах эффекты рассеяния и локализации возникают в широкой полосе час-

<sup>1)</sup>e-mail: v.chistyakov@metalab.ifmo.ru

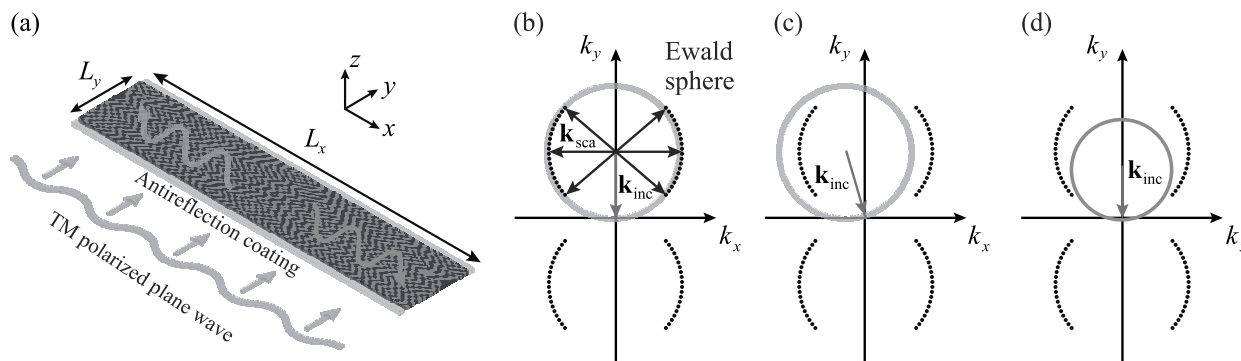


Рис. 1. (Цветной онлайн) (a) – Схематическое изображение квазикристаллической структуры в реальном пространстве, сгенерированное на основе 40 максимумов в обратном пространстве. Длина стороны в продольном сечении составляет  $L_y = 10\lambda_0$ , а для поперечного сечения  $L_x = 50\lambda_0$ , где  $\lambda_0$  – рабочая длина волны. (b) – Построение Эвальда при нормальном падении волны  $\mathbf{k}_{inc}$ , сфера Эвальда (оранжевая кривая) пересекает максимумы в обратном пространстве (черные точки), что приводит к эффективному рассеянию волны  $\mathbf{k}_{sca}$  в поперечном направлении. (c) – Построение Эвальда при косом падении волны  $\mathbf{k}_{inc}$ , соответствующее отсутствию рассеяния. (d) – Построение Эвальда при большой длине волны и нормальном падении, соответствующее отсутствию рассеяния

тот и для разных направлений. При этом о возможности сделать структуру, селективно рассеивающую волну в заданном направлении и на заданных частотах, до сих пор не сообщалось [27].

В этой работе мы предлагаем низкоконтрастные квазикристаллические структуры со спектрально-угловой селективностью рассеяния падающей электромагнитной волны. Для создания структуры мы используем метод обратного дизайна. Используя построение Эвальда, мы задаем в обратном пространстве некоторую функцию, у которой значения отличные от нуля, или *максимумы* расположены таким образом, чтобы излучение определенной длины волны и направления эффективно рассеивалось структурой образца. Мы выполнили расчеты распространения электромагнитной волны в образцах, с учетом реалистичного коэффициента поглощения материала, которые полностью подтверждают наличие ожидаемого эффекта.

В электромагнитных задачах рассеяние задается пространственным распределением диэлектрической проницаемости  $\epsilon(\mathbf{r})$ . Для определения квазикристаллической структуры с желаемыми свойствами был использован дизайн в обратном пространстве [28]. Напомним, что в низкоконтрастных диэлектрических структурах рассеяние падающей волны с волновым вектором  $\mathbf{k}_{inc}$  в волну с волновым вектором  $\mathbf{k}_{sca}$  зависит от интенсивности Фурье образа  $\epsilon(\mathbf{r})$  в точке с координатами  $\mathbf{k}_{sca} - \mathbf{k}_{inc}$ . Для определения условий возникновения рассеяния удобно использовать построение Эвальда. Сфера радиуса  $k_0 = |\mathbf{k}_{inc}|$  с центром в  $-\mathbf{k}_{inc}$  определяет все возможные направления упругого рассеяния. В случае попадания мак-

сима Фурье-образа  $\epsilon(\mathbf{r})$  на сферу Эвальда возникает рассеяние для соответствующего направления. Для рассматриваемой нами задачи сфера Эвальда соответствует окружности. В обратном пространстве мы задаем максимумы вдоль дуг окружности, которые определяют рассеяние волны, падающей по нормали. Таким образом, рассеянные волны будут распространяться внутри образца в секторах, образованных дугами (рис. 1b). На рисунках 1c и d качественно показаны два случая: отклонение по углу от нормали и отклонение от заданной длины волны. Видно, что в этих случаях сфера Эвальда не пересекает максимумы и эффективного рассеяния не возникает, а структура оказывается прозрачной.

Переход к распределению коэффициента преломления в прямом пространстве осуществляется при помощи преобразования Фурье. Чтобы в прямом пространстве получить вещественное распределение, максимумы в обратном пространстве должны быть распределены симметрично, относительно начала координат. Это дополнительное условие приводит к появлению вспомогательных максимумов в нижней полуплоскости (рис. 1b-d).

Технически нам было удобнее задавать распределение диэлектрической проницаемости в прямом пространстве при помощи набора наложенных синусоидальных функций [17, 18]. Поэтому на дугах вдоль окружности радиуса, заданного требуемой длиной волны  $\lambda_0$ , формируется набор максимумов, соответствующих параметрам таких решеток. Мы ограничиваем дуги, вдоль которых имеются максимумы в диапазоне углов  $[-\alpha_c \dots \alpha_c]$ , где  $\alpha_c = 1/\bar{n}$ , а  $\bar{n}$  – средний показатель преломления среды. Изображе-

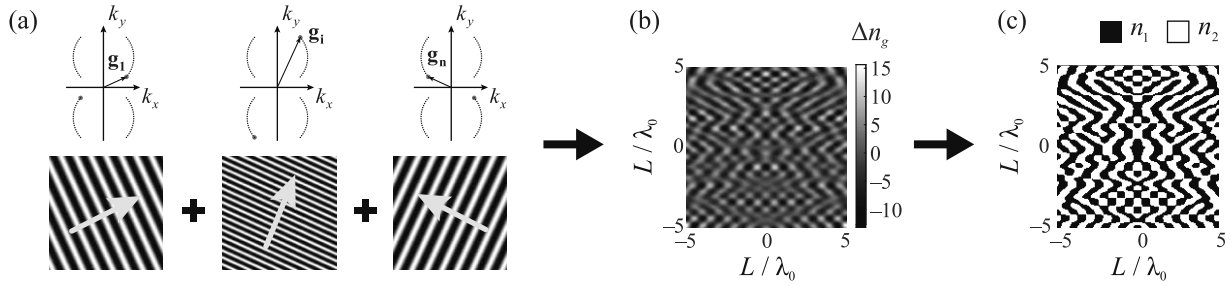


Рис. 2. (а) – Иллюстрация вычисления распределения показателя преломления путем наложения синусоидальных функций, соответствующих в обратном пространстве максимумам Фурье-образа  $\varepsilon(\mathbf{r})$ . (б) – Изображение структуры с непрерывным распределением показателя преломления, сгенерированное на основе 40 максимумов. (с) – Изображение структуры после бинаризации показателя преломления

ния решеток, направления и период которых задаются в соответствии с максимумами, распределенными вдоль дуг, показаны на рис. 2а. При этом распределение материала квазикристаллической структуры задается суперпозицией синусоидальных одномерных решеток (рис. 2б):

$$\Delta n_g(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \Delta n_i \cos(\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{r} + \varphi_i), \quad (1)$$

где  $\Delta n_i$  – амплитуда модуляции показателя преломления для решетки с индексом  $i$ ,  $N$  – общее количество решеток на окружности в верхней полуплоскости,  $\mathbf{g}_i$  – направление нормали к решетке с индексом  $i$ ,  $\varphi_i$  – случайная фаза. Отметим, что при одинаковой фазе всех решеток в начале координат появляется особенность, которая может приводить к нежелательным эффектам. Случайные фазы фактически смещают эту особенность далеко за пределы образца.

Для получения структуры, состоящей только из двух диэлектрических материалов, применяется процедура бинаризации функции непрерывного показателя преломления  $\Delta n_g(\mathbf{r})$ :

$$n_b(\mathbf{r}) = \bar{n} + \Delta n \operatorname{sign}[\Delta n_g(\mathbf{r})], \quad (2)$$

где  $\Delta n$  – отклонение коэффициента преломления от среднего значения  $\bar{n}$ . В результате квазикристаллическая структура с желаемыми свойствами может быть изготовлена из двух материалов с коэффициентами преломления  $n_1 = \bar{n} + \Delta n$  и  $n_2 = \bar{n} - \Delta n$ . Пример такой структуры представлен на рис. 2с.

При изучении аперриодических структур мы не можем использовать теорему Блоха, поэтому требуется проводить исследования полноразмерных структур. В данной работе мы исследуем двумерную квазикристаллическую структуру, которую можно реализовать экспериментально для ТМ-поляризованного электромагнитного излучения,

помещая образец в плоскопараллельный металлический волновод. На рисунке 1а схематически показана квазикристаллическая структура, сгенерированная на основе формул (1) и (2) для  $N = 40$  решеток. Структура имеет размеры  $L_x = 50\lambda_0$  и  $L_y = 10\lambda_0$ ,  $\lambda_0 = 2\pi/k_0$  – рабочая длина волны, на которой должно происходить эффективное рассеяние света при условии нормального падения электромагнитной волны. Структура состоит из материалов с коэффициентами преломления  $n_1 = 1.48$  и  $n_2 = 1.58$ , которые соответствуют широкодоступным полимерным материалам, используемых для трехмерной печати [29, 30]. Технологический процесс позволяет локально изменять плотность напечатанного материала, что обеспечивает диэлектрический контраст. Также мы учитываем поглощение у обоих материалов  $\tan\delta = 0.003$ . Важно отметить, что описанные результаты имеют только количественную зависимость от выбора конкретных значений коэффициентов преломления и величины контраста. Вдоль оси  $x$  мы использовали периодические граничные условия, которые позволяют предсказать результаты для протяженных структур. На границах, через которые проходит падающее излучение, было добавлено четвертьволновое просветляющее покрытие, чтобы минимизировать нежелательное рассеяние, связанное с прохождением раздела двух сред. Внешней средой для структуры является воздух с показателем преломления, близким к 1, поэтому коэффициент преломления для просветляющего покрытия  $n_c = \sqrt{\bar{n}}$ , а толщина слоя  $L_c = \lambda_0/4n_c$ .

Теоретические расчеты проводились при помощи коммерческого программного обеспечения для моделирования распространения электромагнитных волн CST Studio Suite. На рисунке 3а показаны спектры пропускания  $T$  и отражения  $R$  при условиях нормального падения. На спектре пропускания наблю-

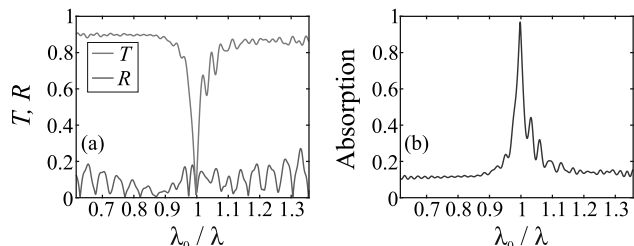


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Голубая и оранжевая линия представляют, соответственно, зависимости коэффициента прохождения  $T$  и отражения  $R$  от безразмерной частоты  $\lambda_0/\lambda$  при нормальном падении ТМ-волны. (б) – Зависимость коэффициента поглощения энергии от безразмерной частоты  $\lambda_0/\lambda$  при нормальном падении ТМ-волны

дается резкий провал на полосе вокруг безразмерной частоты  $\lambda_0/\lambda = 1$  на фоне почти полного пропускания вне этой полосы. При этом спектр отражения во всем диапазоне не превышает 0.1. Волна, рассеявшись в поперечном направлении, распространяется в образце до тех пор, пока не поглотится или не перерассеется в направлениях пропускания или отражения. Чтобы определить количественные характеристики квазикристаллической структуры, рассмотрим величину *захваченной* энергии. Закон сохранения энергии позволяет определить поглотившуюся энергию как  $A = 1 - T - R$ . Спектр поглощения демонстрирует пик на длинах волн, соответствующих полосе непрозрачности структуры  $\lambda \approx \lambda_0$  (рис. 3б). Максимум пика поглощения достигает 94%. Таким образом, квазикристаллическая структура демонстрирует выраженную спектральную селективность поглощения.

Теперь исследуем угловую селективность предложенной квазикристаллической структуры. Используемые для увеличения протяженности образца периодические граничные условия позволяют задать падающую волну, распространяющуюся вдоль оси  $y$ . При этом для случая наклонного падения период вычислительной области изменяется с длиной волны. Поэтому вместо изменения угла падения мы поворачиваем саму структуру в обратном пространстве на угол  $\theta$ , оставляя внешние границы образца неизменными. Полученные при таком подходе результаты не дадут качественного отличия от случая изменения угла падения волны на образец.

На рисунке 4а представлена зависимость спектра пропускания от угла поворота квазикристаллической структуры  $\theta$ . Видно, что минимум пропускания соответствует длине волны  $\lambda = \lambda_0$  и  $\theta = 0$ . По мере изменения угла наблюдается расщепление провала на

две полосы, которые быстро теряют свою интенсивность и при углах  $\theta > 10$  практически исчезают. Зависимость спектра поглощения показана на рис. 4б. Видно, что характер особенностей в спектрах пропускания и поглощения полностью совпадает.

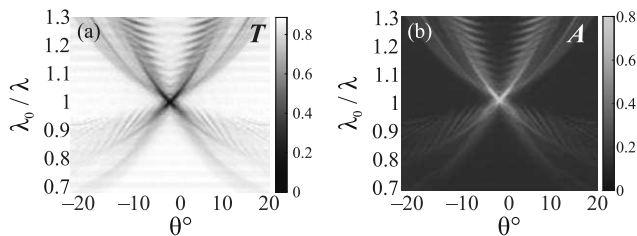


Рис. 4. (Цветной онлайн) Спектральные характеристики в зависимости от ориентации осей в обратном пространстве относительно границ образца  $\theta^\circ$  и безразмерной частоты  $\lambda_0/\lambda$ . (а) – Спектр коэффициента прохождения  $T$ . (б) – Спектр коэффициента поглощения  $A$

Поведение спектральных особенностей хорошо согласуется с моделью на основе построения Эвальда. При нормальном падении волна рассеивается только при выполнении условия  $\lambda = \lambda_0$ , когда сфера Эвальда перекрывается со всеми максимумами вдоль двух дуг (см. рис. 1). Изменение длины волны соответствует изменению радиуса сферы Эвальда и нарушению условия перекрытия с максимумами. Отметим, что для образцов конечного размера максимумы в обратном пространстве размываются из-за соотношения неопределенности координата–волновой вектор (импульс). При небольшом отклонении от нормального падения в обратном пространстве остается перекрытие сферы Эвальда лишь с частью максимумов. В результате при отклонении угла от нулевого значения в спектрах пропускания наблюдаются два провала, которые определяются пересечением одного из максимумов со сферой Эвальда большего радиуса и другого максимума со сферой Эвальда меньшего радиуса. Пересечение лишь с частью максимумов приводит к снижению эффективности интегрального рассеяния падающей волны, что приводит к деградации спектральных особенностей, наблюдаемой на рис. 4а.

Для подтверждения предсказания о формировании селективного рассеяния электромагнитной волны в поперечном направлении были проведены вычисления вектора потока энергии. На рисунке 5 показано распределение по образцу значения величины и направления вектора Пойнтинга для трех разных длин волн. Для длин волн  $\lambda_0 = 0.9\lambda$  (рис. 5а) и  $\lambda_0 = 1.1\lambda$  (рис. 5с) структура прозрачная, и направление вектора Пойнтинга в среднем соответству-

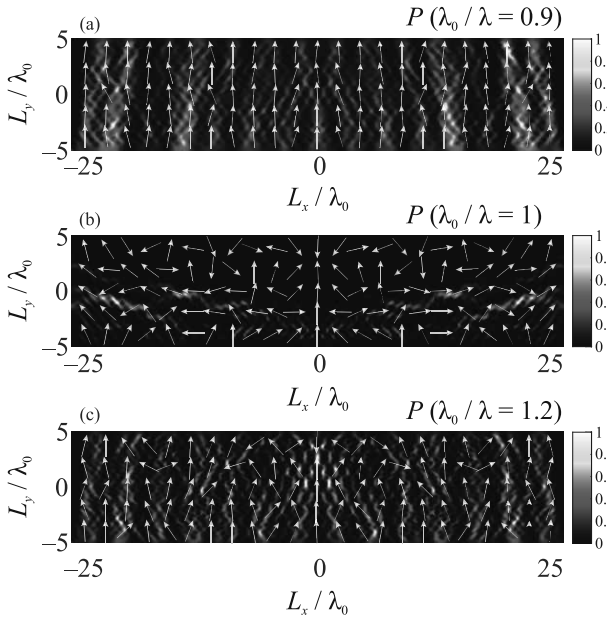


Рис. 5. (Цветной онлайн) Нормированная интенсивность потока мощности электромагнитного поля в структуре при прохождении ТМ-поляризованной плоской волны для нормального падения ((a), (b), (c) –  $\lambda_0/\lambda = 0.9$ ,  $\lambda_0/\lambda = 1$ ,  $\lambda_0/\lambda = 1.1$ ). Белые стрелки показывают направление потока

ет направлению падения. Для рабочей длины волны  $\lambda = \lambda_0$  наблюдается другая картина (рис. 5b). Образец перенаправляет энергию падающей волны в перпендикулярном направлении, как предполагалось при дизайне квазикристаллической структуры в обратном пространстве с использованием построения Эвальда.

Таким образом, мы продемонстрировали квазикристаллическую структуру с частотно-угловой селективностью рассеяния электромагнитных волн, заданную на основе метода дизайна в обратном пространстве. Однородное распределение максимумов по дугам в обратном пространстве соответствует множеству решеток в прямом пространстве. Рассеяние и последующее поглощение электромагнитных волн в такой структуре наблюдается только при заданном угле падения и на определенной частоте. Мы показали, что можно достичь до 94% селективного поглощения при низком контрасте материалов 1.07. Картина распределения потока мощности электромагнитного поля в плоскости структуры продемонстрировала направленный перенос энергии вдоль структуры только для заданной длины волны. Мы ожидаем, что предложенные квазикристаллические структуры откроют широкие возможности при создании новых фотонных устройств с беспрецедентными свойствами.

Авторы благодарят А. Ю. Петрова за обсуждение идеи работы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант # 20-79-10316).

1. E. Yablonovitch, Phys. Rev. Lett. **58**, 2059 (1987).
2. J. D. Joannopoulos, P. R. Villeneuve, and S. Fan, Nature **386**, 143 (1997).
3. J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, J. N. Winn, and R. D. Meade, Princet. Univ. Press. Princeton, NJ [ua] (2008).
4. M. V. Rybin and M. F. Limonov, Phys.-Uspekhi **62**, 823 (2019).
5. P. Tonkaev and Y. Kivshar, JETP Lett. **112**, 615 (2020).
6. A. M. Chernyak, M. G. Barsukova, A. S. Shorokhov, A. I. Musorin, and A. A. Fedyanin, JETP Lett. **111**, 46 (2020).
7. S. Molesky, Z. Lin, A. Y. Piggott, W. Jin, J. Vucković, and A. W. Rodriguez, Nat. Photonics **12**, 659 (2018).
8. M. M. R. Elsayy, S. Lanteri, R. Duvigneau, J. A. Fan, and P. Genevet, Laser Photonics Rev. **14**, 1900445 (2020).
9. K. R. Safronov, V. O. Bessonov, and A. A. Fedyanin, JETP Lett. **114**, 321 (2021).
10. P. R. Wiecha, A. Arbouet, C. Girard, and O. L. Muskens, Photonics Nanostructures: Fundam. Appl. **9**, B182 (2021).
11. P. R. Wiecha, A. Y. Petrov, P. Genevet, and A. Bogdanov, Photonics Nanostructures: Fundam. Appl. **52**, 101084 (2022).
12. P. M. Piechulla, B. Fuhrmann, E. Slivina, C. Rockstuhl, R. B. Wehrspohn, and A. N. Sprafke, Adv. Opt. Mater. **9**, 2170068 (2021).
13. W. Man, M. Florescu, K. Matsuyama, P. Yadak, G. Nahal, S. Hashemizad, E. Williamson, P. Steinhardt, S. Torquato, and P. Chaikin, Opt. Express **21**, 19972 (2013).
14. A. D. Sinelnik, I. I. Shishkin, X. Yu, K. B. Samusev, P. A. Belov, M. F. Limonov, P. Ginzburg, and M. V. Rybin, Adv. Opt. Mater. **8**, 2001170 (2020).
15. P. Wang, Y. Zheng, X. Chen, C. Huang, Y. V. Kartashov, L. Torner, V. V. Konotop, and F. Ye, Nature **577**, 42 (2020).
16. N. Lassaline, R. Brechbühler, S. J. Vonk, K. Ridderbeek, M. Spieser, S. Bisig, B. Le Feber, F. T. Rabouw, and D. J. Norris, Nature **582**, 506 (2020).
17. L. Maiwald, T. Sommer, M. S. Sidorenko, R. R. Yafyasov, M. E. Mustafa, M. Schulz, M. V. Rybin, M. Eich, and A. Y. Petrov, Adv. Opt. Mater. **10**, 2100785 (2022).
18. V. A. Chistyakov, M. S. Sidorenko, A. D. Sayanskiy, and M. V. Rybin, Phys. Rev. B **107**, 014205 (2023).
19. K. C. Neuman and S. M. Block, Rev. Sci. Instrum. **75**, 2787 (2004).

20. K. X. Wang, Z. Yu, V. Liu, A. Raman, Y. Cui, and S. Fan, *Energy Environ. Sci.* **7**, 2725 (2014).
21. T. M. Mercier, T. Rahman, C. Krishnan, E. Khorani, P. J. Shaw, M. E. Pollard, S. A. Boden, P. G. Lagoudakis, and M. D. Charlton, *Nano Energy* **84**, 105874 (2021).
22. C. Guo, T. Sun, F. Cao, Q. Liu, and Z. Ren, *Light Sci. Appl.* **3**, e161 (2014).
23. R. Saive, *Progress in Photovoltaics: Research and Applications* **29**, 1125 (2021).
24. P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958).
25. S. John, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2486 (1987).
26. L. Levi, M. Rechtsman, B. Freedman, T. Schwartz, O. Manela, and M. Segev, *Science* **332**, 1541 (2011).
27. A. Petrov (private communications in December of 2021).
28. L. Maiwald, S. Lang, D. Jalas, H. Renner, A. Y. Petrov, and M. Eich, *Opt. Express* **26**, 11352 (2018).
29. Y. Kim, M. M. Tentzeris, and S. Lim, *Materials* **12**, 402 (2019).
30. G. Boussatour, P.-Y. Cresson, B. Genestie, N. Joly, and T. Lasri, *IEEE Microw. Wirel. Compon. Lett.* **28**, 374 (2018).

# Характеристики “пылевых” потоков с поверхности лайнеров из меди и свинца при выходе на нее одной или последовательно двух ударных волн

В. А. Огородников, С. В. Ерунов, К. Н. Панов, Е. А. Чудаков, И. А. Блинов<sup>1)</sup>, А. Б. Георгиевская, Д. Н. Замыслов, И. Р. Фарин

Нижегородский государственный технический университет им. Р. Е. Алексеева, 603155 Н. Новгород, Россия

Поступила в редакцию 10 марта 2023 г.

После переработки 12 апреля 2023 г.

Принята к публикации 18 апреля 2023 г.

Приведены результаты впервые проведенных сравнительных экспериментальных исследований процесса ударно-индуцированного выброса частиц (“пыления”) со свободной шероховатой (Rz20) поверхности лайнеров из меди и свинца при выходе на нее одной или последовательно двух ударных волн, разделенных по времени на 0.2 мкс. Такая ситуация возникает, как правило, в кумулирующих системах для сжатия плазмы цилиндрическими или сферическими лайнерами при их ударно-волновом или квазиизэнтропическом ускорении продуктами взрыва. С использованием методик импульсной рентгенографии, лазерно-оптической съемки, пьезоэлектрических датчиков давления и гетеродин-интерферометра исследована качественная картина и определены количественные характеристики процесса выброса частиц со свободной поверхности (СП): скорости СП и фронта потока (ФП) частиц, распределения плотности (массы) потока частиц в направлении его движения, необходимые для уточнения имеющихся особенностей и создания более обоснованных моделей описания эффекта.

DOI: 10.31857/S1234567823100063, EDN: cmiech

**1. Введение.** Эффект ударно-индуцированного пыления в физике ударных волн (УВ), связанный с выбросом частиц со свободной поверхности (СП) вещества при выходе на нее УВ, достаточно подробно исследовали в последнее десятилетие теоретически и экспериментально [1–24]. Получены данные о влиянии на эффект характеристик шероховатости поверхности, амплитуды УВ и фазового состояния материала, наличия газа перед СП и давления в нем. Обсуждены способы подавления эффекта.

Однако существуют схемы разгона лайнеров с помощью взрывчатых веществ, при использовании которых на СП выходит не одна, а последовательно несколько УВ. При этом ситуация с выбросом частиц с СП заметно усложняется. С одной стороны, казалось бы, после выхода на СП первой УВ микронеровности частично устраняются, а ускоренная второй УВ СП может подхватить поток частиц от первой УВ. С другой стороны, при выходе на СП второй УВ могут формироваться, при определенных условиях, струйные течения из областей между струями, которые сформировались после выхода на СП первой УВ. Кроме того, при разгрузке материала лайнера после выхода на СП первой УВ, могут в нем формироваться

микродефекты, которые будут являться дополнительным источником “пыления” для второй УВ.

В данной работе приведены новые результаты по исследованию эффекта ударно-индуцированного “пыления”, связанного с выходом на СП лайнеров в виде пластин из свинца (С1) и меди (М1) последовательно двух УВ с интервалом времени между ними  $\sim 0.2$  мкс. Причем амплитуда первой и второй УВ составляла 46 и 67 ГПа для меди и 39 и 59 ГПа – для свинца, что было недостаточно для плавления меди в волне разгрузки и достаточно для плавления свинца на первой УВ [13, 19, 25].

Полученные результаты сравниваются с результатами работы [23], в которой исследовали качественную картину и количественные характеристики процесса ударно-индуцированного “пыления” при выходе на СП аналогичных лайнеров из меди и свинца только одной УВ с примерно той же амплитудой 50 и 45 ГПа. Впервые установлено и количественно подтверждено, что выход второй ударной волны на свободную поверхность лайнера может заметно повлиять на количественные характеристики эффекта ударно-индуцированного “пыления” для лайнеров, материал которых не плавится в условиях ударно-волнового нагружения.

**2. Постановка экспериментальных исследований.** В данной работе использовали постановку

<sup>1)</sup>e-mail: postmaster@ifv.vniief.ru

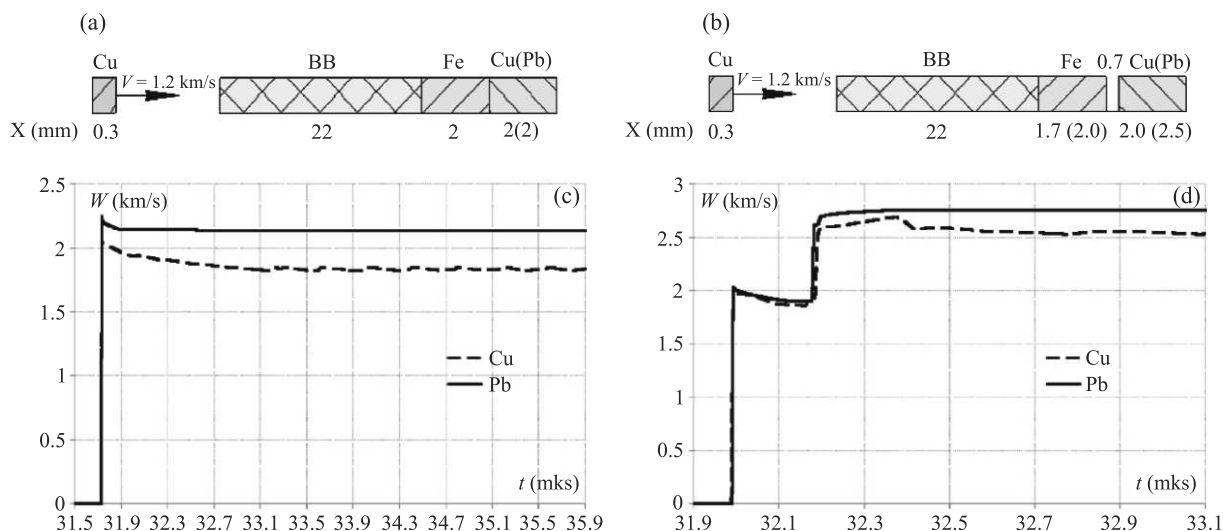


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схемы нагружения образцов и профили скорости  $W(t)$  для одно- и двухволновой конфигурации выхода УВ на СП

опытов из [23], приведенную на рис. 1а. Для реализации двухволновой конфигурации лайнеры из меди (М1) и свинца (С1) в виде пластин диаметром 108 мм и толщиной 2.0 и 2.5 мм отделяли от пластин из стали 12Х18Н10Т вакуумированным зазором величиной 0.7 мм (рис. 1б). Пространство перед СП также вакуумировали ( $P_{\text{ост}} = 1.2$  кПа).

На рисунке 1с, d приведены зависимости скорости СП от времени, рассчитанные по одномерным программам РФЯЦ-ВНИИЭФ [26], для случая с одноволновым и двухволновым нагружением СП лайнеров из меди и свинца.

Двухволновой режим нагружения СП связан с циркуляцией ударных волн и волн разрежения в образцах из меди (или свинца) после схлопывания указанного зазора. Выбранные схемы нагружения позволяют реализовывать близкие величины скоростей и амплитуд давления при выходе на СП первой и второй УВ для образцов из меди и свинца и интервал времени между ними  $\sim 0.2$  мкс. Причем медь не плавится в этих условиях нагружения ( $P_1 = 46$  ГПа,  $P_2 = 67$  ГПа), а свинец плавится уже на первой УВ ( $P_1 = 39$  ГПа,  $P_2 = 59$  ГПа) [13, 19, 25]. Эти особенности важны с точки зрения исследования процесса ударно-индуцированного “пыления”. Также как и в [23] образцы из меди и свинца диаметром 108 мм и толщиной 2 мм изготавливали со специально обработанной СП, полоска которой шириной  $\sim 0.4$  мм имела ту же шероховатость Rz20 ( $2\alpha_0 = 20$  мкм,  $\lambda = 150$  мкм).

С целью повышения информативности и достоверности получаемых результатов одновремен-

но использовали несколько измерительных методик, основанных на разных физических принципах: теневую лазерно-оптическую, рентгенографическую, пьезоэлектрическую и методику гетеродин-интерферометра (PDV-датчиков).

Эксперименты проводили на измерительно-испытательном комплексе “Пыление” [17]. В каждом опыте с использованием перечисленных выше методик получали качественную картину и определяли количественные характеристики процесса ударно-индуцированного “пыления”: скорости свободной поверхности и фронта потока частиц, распределения плотности и массы потока частиц в направлении его движения. Более подробное описание постановки опытов можно найти в работе [23].

**3. Результаты экспериментов и их обсуждение.** Полученные в данной работе результаты с использованием методик теневой лазерно-оптической съемки и PDV-датчиков приведены на рис. 2, 3. Здесь же приведены для сравнения результаты, полученные в экспериментах при выходе на СП одной УВ [23]. С использованием этих методик наиболее рельефно визуализируется качественная картина процесса ударно-индуцированного “пыления” при выходе одной или двух УВ.

Так, например, при выходе одной УВ на СП образца из меди на кадрах теневой лазерно-оптической съемки наблюдается поток частиц, заметно ее опережающий, и откольные фрагменты вблизи СП (рис. 2б). При выходе на СП аналогичного образца последовательно двух УВ качественная картина не изменяется, однако частицы и фрагменты отко-



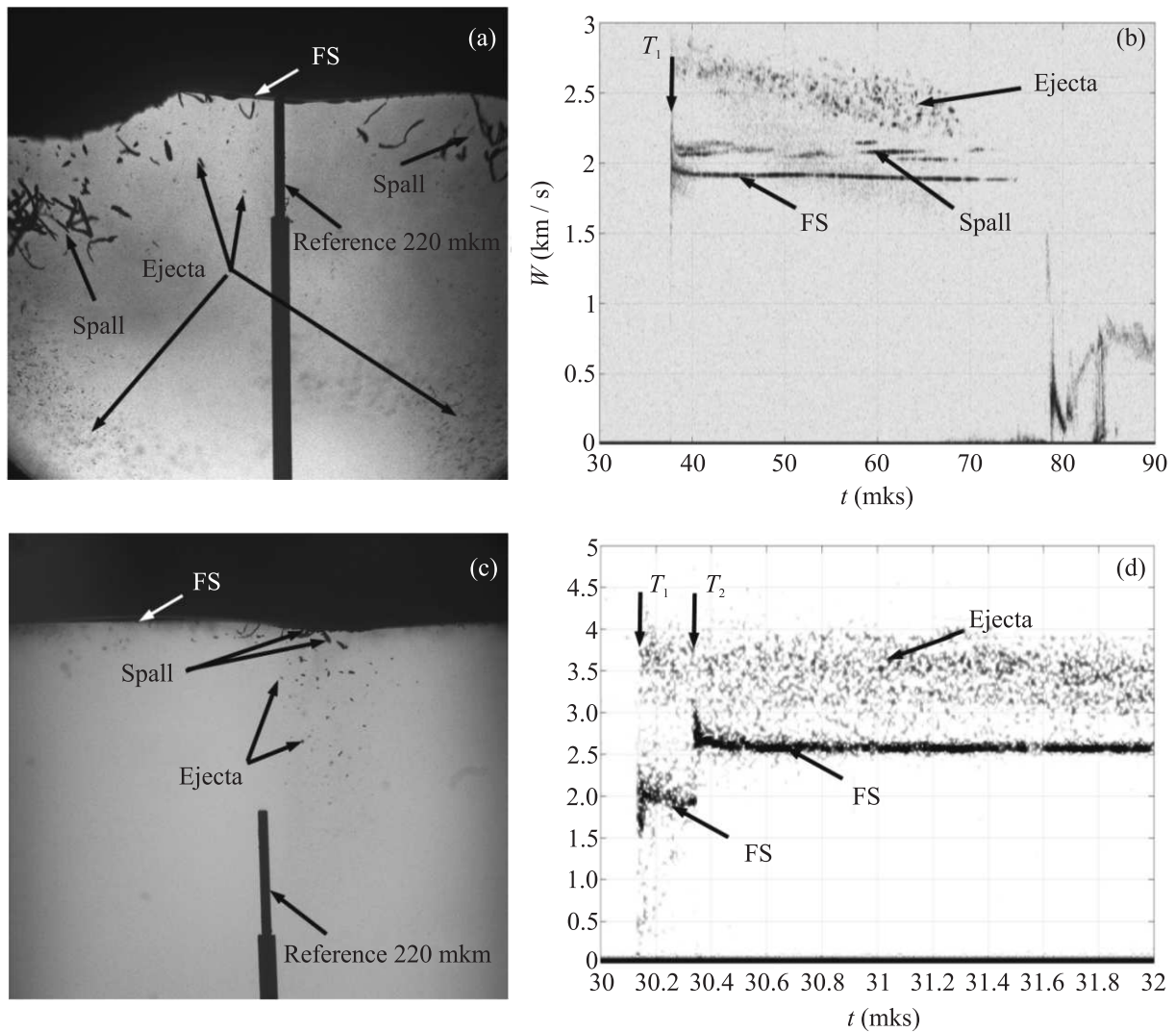


Рис. 2. Результаты экспериментов с образцами из меди при выходе на СП одной (а), (b) и двух (с), (d) УВ,  $T_1$  – выход на СП первой УВ,  $T_2$  – выход на СП второй УВ

лов частично собираются СП, ускоренной второй УВ (рис. 2d).

При выходе одной УВ на СП образца из свинца качественная картина процесса ударно-индуцированного “пыления” заметно отличается (рис. 3а), что связано, по-видимому, с его плавлением. Из микрорельефа на СП выбрасываются микропотоки в виде кумулятивных струйных течений, которые распадаются со временем на частицы за счет наличия градиента скорости вдоль струй. Так же, как и для образцов из меди, при выходе на СП образца из свинца второй УВ происходит поджатие ею потока частиц (рис. 3с).

Вид спектрограмм профилей скорости движения СП и пылевых потоков при выходе одной (рис. 2b, 3b) или двух (рис. 2d, 3d) УВ не противоречит каче-

ственной картине процесса ударно-индуцированного “пыления”, регистрируемого с помощью теневой лазерно-оптической съемки (рис. 2а, с, 3а, с). Так для лайнера из меди при выходе на СП одной УВ на спектрограмме наблюдаются особенности, связанные с наличием перед ней частиц и откольных фрагментов. При выходе на СП лайнера из меди двух УВ, которые отчетливо регистрируются в моменты времени  $T_1$  и  $T_2$ , наблюдается выброс только частиц. Из рисунка 2d следует, что скорость СП после выхода второй УВ увеличивается с 2.0 до 2.7 км/с, при этом скорость ФП частиц не изменяется и составляет  $W_{FP} \approx 3.8$  км/с. Это может свидетельствовать о том, что заметного дополнительного выброса частиц, связанного с выходом на СП второй УВ, не наблюдается. Для лайнеров из

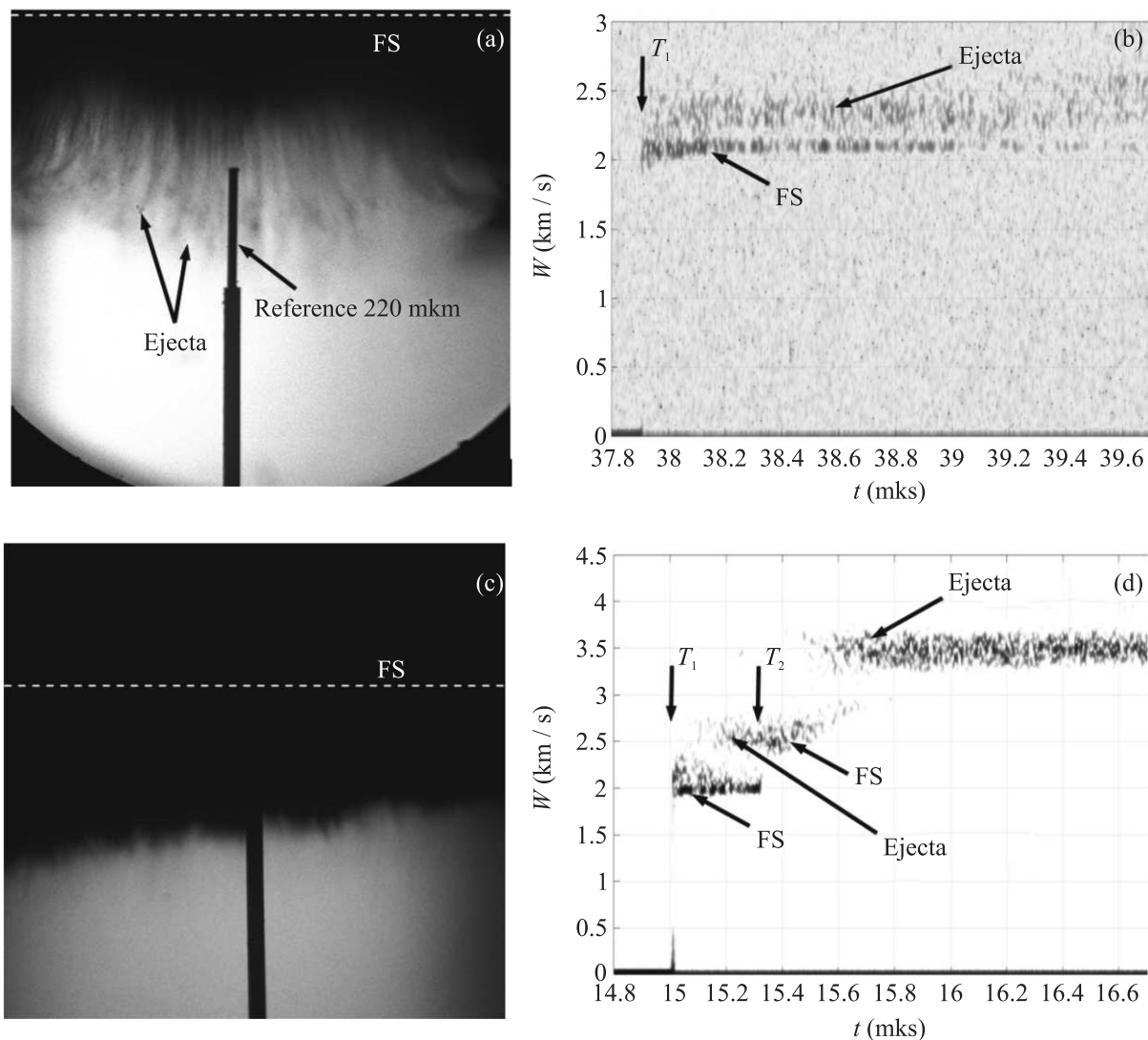


Рис. 3. Результаты экспериментов с образцами из свинца при выходе на СП одной (а), (b) и двух (с), (d) УВ,  $T_1$  – выход на СП первой УВ,  $T_2$  – выход на СП второй УВ

свинца при выходе на СП одной УВ на спектрограмме наблюдаются особенности, связанные только с наличием перед ней частиц, а при выходе на СП двух УВ в моменты времени  $T_1$  и  $T_2$  наблюдается выброс частиц на первой УВ ( $W_{FP} \approx 2.8$  км/с) и второй УВ ( $W_{FP} \approx 3.6$  км/с).

На рисунке 4 приведены  $X-t$  диаграммы движения СП и переднего фронта потоков частиц, построенные с использованием данных всех применяемых методик, которые свидетельствуют об их удовлетворительном согласии.

Что касается ответа на вопрос о количественных характеристиках массы потоков выброшенных частиц при выходе на СП двух УВ, то здесь необходимо привлечь количественные данные, полученные в этих экспериментах с использованием рентгено-

графической методики (рис. 5а, с) и методики пьезоэлектрических датчиков (рис. 5b, d). При определении распределения плотности (массы) в потоке частиц (рис. 6) для перевода матрицы отсчетов почернения по изображению на рис. 5а и с в матрицу массовых толщин использовали эталонные клинья из меди и свинца соответственно [27].

На рисунке 6 приведены распределения плотности и массы потока частиц в направлении его движения в зависимости от времени и от относительной скорости частиц в потоке, полученные при обработке по обоим методикам. Массы потоков частиц определяли для частиц, имеющих скорость больше скорости СП в 1.05 раз. Распределения плотности потока частиц из меди с использованием рентгенографической методики не определяли, так как ее значения

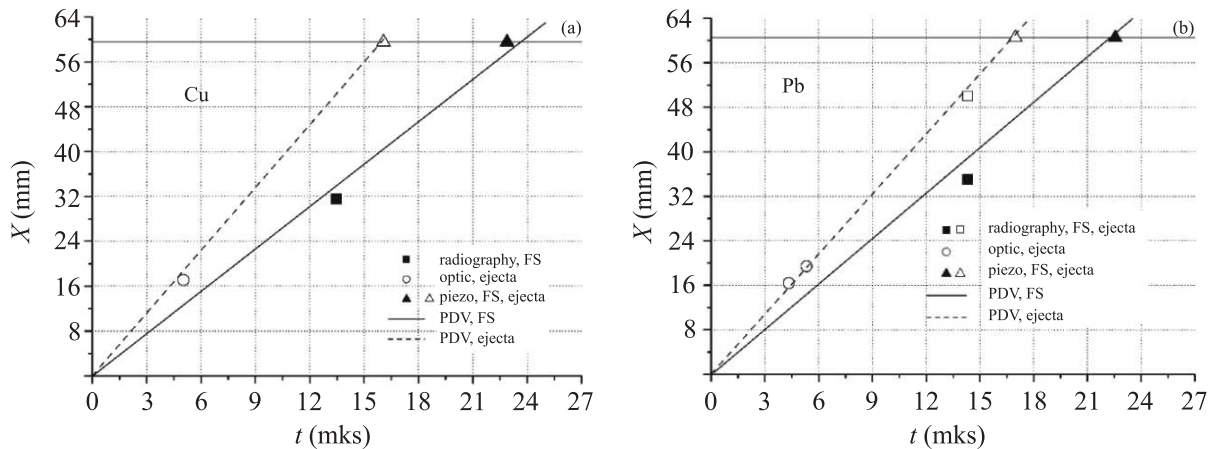


Рис. 4.  $X-t$  диаграммы процесса “пыления” с СП образцов из меди (а) и свинца (б) при выходе на СП двух УВ

находятся ниже уровня разрешающей способности методики ( $\rho_{\min} \Delta l = 1 \text{ мг/см}^2$ ).

Усредненные результаты их обработки в виде удельной на единицу поверхности массы потока частиц, проведенные в той же манере, что и в [23], приведены в табл. 1.

**Таблица 1.** Усредненные массы потоков частиц, полученные рентгенографической и пьезоэлектрической методиками

Материал	Количество УВ	Шероховатость $2\alpha/\lambda$ , мкм	$m$ , мг/см <sup>2</sup>
Медь	1 [23]	20/150	$12.5 \pm 1.9$
	2	15/150	$0.7 \pm 0.3$
Свинец	1 [23]	18/150	$25.0 \pm 3.8$
	2	20/120	$26.5 \pm 4.0$

Данные по распределению массы потоков от удельной скорости, полученные по обоим методикам, демонстрируют их удовлетворительное согласие. Анализ полученных результатов свидетельствует о том, что в случае лайнеров из меди, материал которой не плавится в условиях проводимого эксперимента, при выходе второй УВ, по-видимому, дополнительного выброса частиц не происходит, а СП, ускоренная второй УВ, собирает более медленные частицы, образованные при выходе первой УВ. Поэтому масса потока частиц после выхода на СП двух УВ заметно меньше, чем при выходе одной УВ (таблица). Для лайнеров из свинца, который плавится после выхода на СП первой УВ, массы потока частиц при выходе на СП одной или двух УВ близки. Это может быть связано с тем, что при выходе второй УВ происходит дополнительный выброс частиц из межструйного пространства, а после ускорения ею СП происходит подхват более крупных и мед-

ленных частиц, что приводит к уменьшению общего числа частиц в потоке. В результате этих процессов массы потоков частиц при одно- и двухволновом нагружении лайнеров из свинца, материал которого плавится в данных условиях нагружения, оказались близки.

**4. Выводы.** При выходе на СП образцов с чистотой ее обработки Rz20 последовательно двух УВ амплитудой 46 и 67 ГПа (для меди) и 39 и 59 ГПа (для свинца) с интервалом  $\sim 0.2-0.3$  мкс:

- о качественная картина процесса ударно-индуцированного “пыления”, так же, как и при выходе одной УВ, определяется прочностью или фазовым состоянием материала и характеризуется выбросом потока частиц и микрооткольных фрагментов, если материал (медь) не плавится, и выбросом струйных течений с последующим их распадом на микрочастицы, если материал (свинец) плавится в условиях ударно-волнового нагружения;

- о при выходе на СП второй УВ происходит дополнительный выброс частиц, если материал лайнера не обладает прочностью (плавление свинца), и не происходит заметного дополнительного выброса частиц, если материал обладает прочностью (медь не плавится);

- о скорости фронта потока частиц для лайнеров из меди и свинца составляют 3.8 и 3.6 км/с и определяются выходом на СП первой и второй УВ соответственно;

- о за счет подхвата выброшенных откольных фрагментов и частиц СП, ускоренной второй УВ, удельная на единицу поверхности масса потока частиц для лайнеров из меди уменьшается с  $(12.5 \pm 1.5) \text{ мг/см}^2$  до  $(0.7 \pm 0.3) \text{ мг/см}^2$ , а для лайнеров из свинца – практически не изменяется, за счет

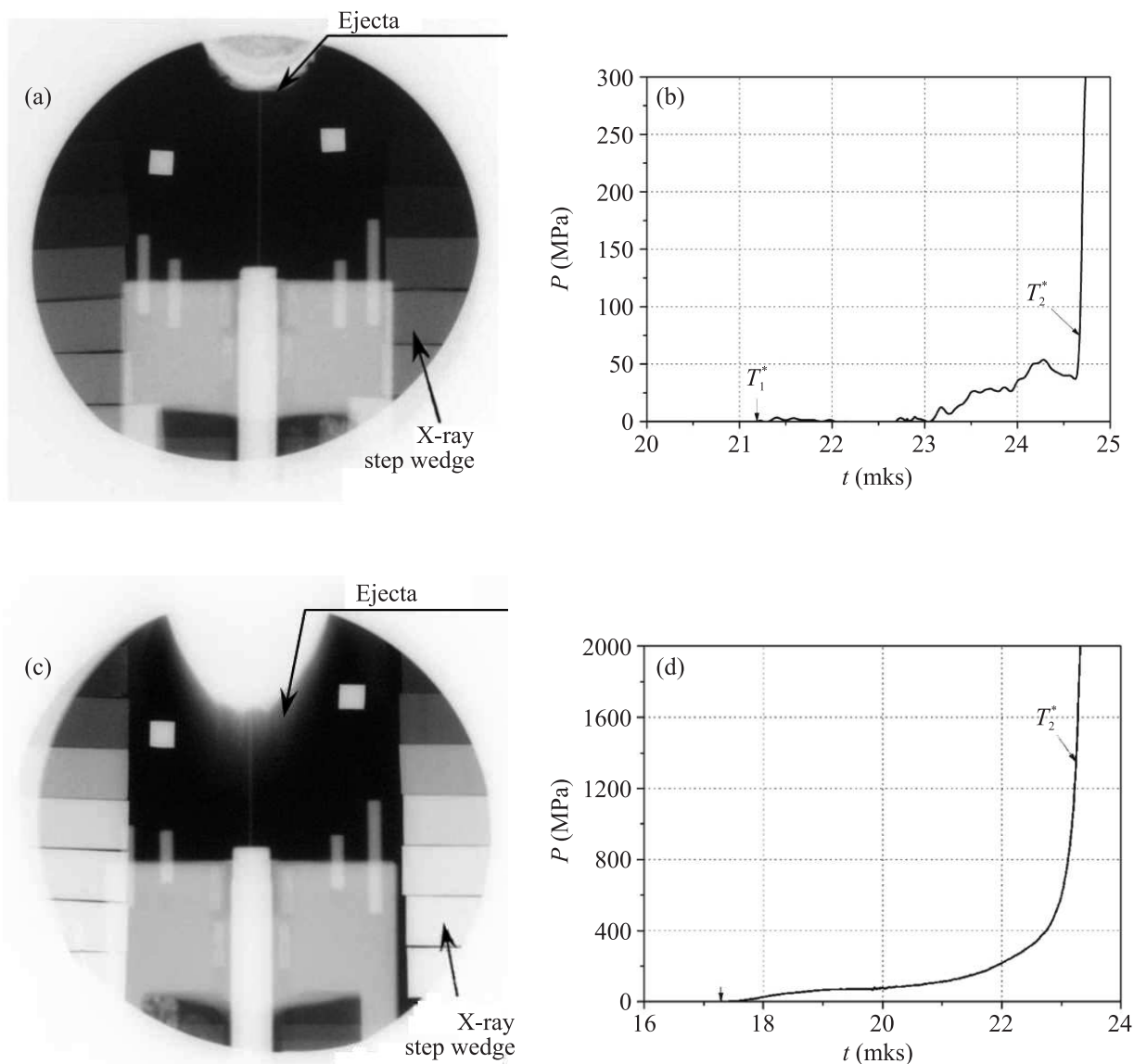


Рис. 5. Рентгенограммы и профили давления, полученные при выходе на СП двух УВ для меди (а), (b) и свинца (с), (d),  $T_1^*$  – момент подлета к пьезодатчикам потока частиц,  $T_2^*$  – момент подлета к пьезодатчикам СП

дополнительного выброса частиц на второй УВ и подхвата более медленных частиц СП, и составляет  $(26.0 \pm 4.0)$  мг/см<sup>2</sup>.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда # 23-22-00051, <https://rscf.ru/project/23-22-00051/>.

1. В. А. Огородников, А. Л. Михайлов, В. В. Бурцев, С. А. Лобастов, С. В. Ерунов, А. В. Романов, А. В. Руднев, Е. В. Кулаков, Ю. Б. Базаров, В. В. Глушихин, И. А. Калашник, В. А. Цыганов, Б. И. Ткаченко, *ЖЭТФ* **136**, 615 (2009).

2. С. Б. Бахрах, И. Ю. Безрукова, А. Д. Ковалева, С. С. Косарин, О. В. Ольхов, *ВАНТ, сер.: Матем. Моделирование физических процессов* **3**, 14 (2005).
3. T. de Resseguier, L. Signor, A. Dragon, M. Boustie, G. Roy, and F. Llorca, *J. Appl. Phys.* **101**, 013506 (2007).
4. M. B. Zellner, M. Grover, J. E. Hammerberg et al. (Collaboration), *J. Appl. Phys.* **102**, 013522 (2007).
5. T. C. Germann, J. E. Hammerber, and G. Dimonte, *7th Biannual Int. Conf. New models and hydrocodes for shock wave processes in condensed matter*, Portugal, Estorie [Lisbon]: ADAI, 18–23 May (2008).

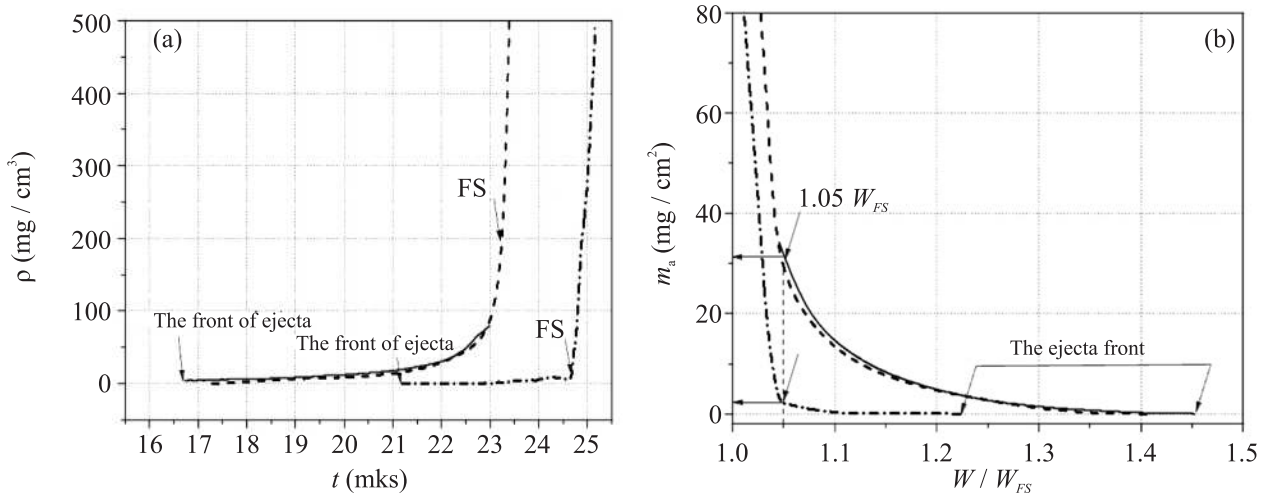


Рис. 6. Распределения плотности (а) и массы (б) потока частиц в направлении его движения в зависимости от времени и относительной скорости частиц в потоке, свинец: — рентген, - - пьезо; медь: - · - пьезо

6. Н. В. Невмержицкий, А. Л. Михайлов, В. А. Раевский, В. С. Сасик, Ю. М. Макаров, Е. А. Сотсков, А. В. Руднев, *Труды XIII международной конференции. Харитоновские научно-тематические чтения*, ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», Саров (2011), с. 604.
7. А. Б. Георгиевская, В. А. Раевский, *Труды XIII международной конференции. Харитоновские научно-тематические чтения*, ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», Саров (2011), с. 597.
8. G. Dimonte, G. Terrones, and F. Cherne, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 264502 (2011).
9. Y. Chen, H. Hu, T. Tang, G. Ren, and Q. Li, *J. Appl. Phys.* **111**, 053509 (2012).
10. D. M. Or'о, J. E. Hammerberg, W. T. Buttler, F. G. Mariani, C. Morris, C. Rousculp, and J. B. Stone, *AIP Conf. Proc.* **1426**, 1351 (2012).
11. D. S. Sorenson, R. M. Malone, G. A. Capelle, P. Pazuchanics, R. P. Johnson, M. L. Kaufman, A. Tibbitts, T. Tunnell, D. Marks, M. Grover, B. Marshall, G. D. Stevens, W. D. Turley, and B. LaLone, *Proc. NEDPC 2013, Livermore, California, US, LA-UR-14-23036* (2013).
12. М. В. Антипов, А. Б. Георгиевская, В. В. Игннин, В. Н. Князев, А. И. Лебедев, М. О. Лебедева, К. Н. Панов, В. А. Раевский, В. Д. Садун, А. А. Утенков, И. В. Юртов, *Труды XV международной конференции Харитоновские научно-тематические чтения*, ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», Саров (2013), с. 666.
13. А. В. Федоров, А. Л. Михайлов, С. А. Финюшин, Д. В. Назаров, Е. А. Чудаков, Д. А. Калашников, Е. И. Бутусов, *Труды XV международной конференции. Харитоновские научно-тематические чтения*, ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», Саров (2013), с. 274.
14. Н. В. Невмержицкий, Е. А. Сотсков, Е. Д. Сеньковский, С. А. Абакумов, С. В. Фролов, О. А. Кривонос, А. В. Руднев, О. Н. Апрельков, А. Б. Георгиевская, *Труды XV международной конференции. Харитоновские научно-тематические чтения*, ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», Саров (2013), с. 655.
15. S. K. Monfared, D. M. Or'о, M. Grover, J. E. Hammerberg, B. M. LaLone, C. L. Pack, M. M. Schauer, G. D. Stevens, J. B. Stone, W. D. Turley, and W. T. Buttler, *J. Appl. Phys.* **116**, 063504 (2014).
16. S. K. Monfared, W. T. Buttler, D. K. Frayer, M. Grover, J. E. Hammerberg, B. M. LaLone, G. D. Stevens, J. B. Stone, W. D. Turley, and M. M. Schauer, *J. Appl. Phys.* **117**, 223105 (2015).
17. А. Л. Михайлов, В. А. Огородников, В. С. Сасик и др. (Collaboration), *ЖЭТФ* **145**, 892 (2014).
18. В. А. Огородников, А. Л. Михайлов, В. С. Сасик и др. (Collaboration), *ЖЭТФ* **149**, 411 (2016).
19. В. А. Огородников, А. Л. Михайлов, С. В. Ерунов и др. (Collaboration), *ЖЭТФ* **152**, 1156 (2017).
20. W. T. Buttler, S. K. Lamoreaux, R. K. Schulze et al. (Collaboration), *J. Dyn. Behav. Mater.* **3**, 334 (2017).
21. V. A. Ogorodnikov, A. L. Mikhaylov, S. V. Erunov et al. (Collaboration), *J. Dyn. Behav. Mater.* **3**, 225 (2017).
22. Н. В. Невмержицкий, В. А. Раевский, Е. А. Сотсков, Е. Д. Сеньковский, Н. Б. Давыдов, Е. В. Бодров, С. В. Фролов, К. В. Анисифоров, А. Б. Георгиевская, Е. В. Левкина, О. Л. Кривонос, *Физика горения и взрыва* **54**, 5 (2018).
23. В. А. Огородников, А. Л. Михайлов, С. В. Ерунов и др. (Collaboration), *ЖЭТФ* **156**, 474 (2019).
24. В. А. Огородников, С. В. Ерунов, А. О. Бликов и др. (Collaboration), *ЖЭТФ* **160**, 621 (2021).

25. В. П. Копышев, А. В. Медведев, *Термодинамическая модель сжимаемого ковалюма. Препринт*, РФЯЦ-ВНИИЭФ, Саров (1995).
26. Н. Ф. Гаврилов, Г. Г. Иванова, В. И. Семин, В. Н. Софронов, ВАНТ, сер. Методики и программы численного решения задач математической физики **3**, 11 (1982).
27. М. В. Антипов, А. Б., Георгиевская, В. В. Игонин, М. О. Лебедева, К. Н. Панов, А. А. Утенков, В. Д. Садун, И. В. Юртов, *Труды XVII международной конференции Харитоновские тематические научные чтения*, ФГУП “РФЯЦ-ВНИИЭФ”, Саров (2015), с. 702.

# Образование капель параметра порядка и сверхпроводимость в неоднородных Ферми–Бозе смесях (Миниобзор)

М. Ю. Каган<sup>a,b1)</sup>, С. В. Аксенов<sup>c</sup>, А. В. Турлапов<sup>d,e,f</sup>, Р. Ш. Ихсанов<sup>a</sup>, К. И. Кугель<sup>g,a</sup>, Е. А. Мазур<sup>h,i</sup>,  
Е. А. Кузнецов<sup>j,k,l</sup>, В. М. Силкин<sup>m,n,o</sup>, Е. А. Буровский<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики, 101000 Москва, Россия

<sup>b</sup>Институт физических проблем им. П. Л. Капицы РАН, 119334 Москва, Россия

<sup>c</sup>Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения РАН, Федеральный исследовательский центр “Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук”, 660036 Красноярск, Россия

<sup>d</sup>Институт прикладной физики РАН, 603155 Н. Новгород, Россия

<sup>e</sup>Московский физико-технический институт, 141701 Долгопрудный, Россия

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

<sup>g</sup>Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН, 125412 Москва, Россия

<sup>h</sup>Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, 115409 Москва, Россия

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

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

<sup>k</sup>Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау, 119334 Москва, Россия

<sup>l</sup>Сколковский институт науки и технологии, 121205 Сколково, Россия

<sup>m</sup>Donostia International Physics Center (DIPC), 20018 San Sebastian/Donostia, Basque Country, Spain

<sup>n</sup>Departamento de Polimeros y Materiales Avanzados: Fisica, Quimica y Tecnologia, Facultad de Ciencias Quimicas, Universidad del Pais Vasco UPV/EHU, Apartado 1072, 20080 San Sebastian/Donostia, Basque Country, Spain

<sup>o</sup>IKERBASQUE, Basque Foundation for Science, 48013 Bilbao, Basque Country, Spain

Поступила в редакцию 3 апреля 2023 г.

После переработки 8 апреля 2023 г.

Принята к публикации 9 апреля 2023 г.

В обзоре рассмотрен ряд систем, описываемых неоднородной (пространственно-разделенной) Ферми–Бозе смесью, со сверхпроводящими кластерами или каплями параметра порядка в матрице распаренных нормальных состояний. Пространственно-разделенная Ферми–Бозе смесь реализуется в сверхпроводящих оксидах висмута ВаКВіО<sub>3</sub>. Капли параметра порядка могут возникать в тонких пленках грязного металла, описываемых 2D моделью Хаббарда малой электронной плотности с сильным притяжением и сильным диагональным беспорядком. Бозе-конденсатные капли формируются в разбалансированных по плотностям компонент Ферми–Бозе смесях и дипольных газах. Бозе-конденсатные кластеры возникают также в центре или на периферии магнитной ловушки в спин-поляризованных Ферми-газах. Экситонные и плазмонные коллапсирующие капли могут формироваться при притягательном знаке экситон–экситонного или плазмон–плазмонного взаимодействия. Плазмонный вклад в экранировку заряда в MgB<sub>2</sub> приводит к возникновению неоднородных, модулированных в пространстве структур. В металлическом водороде и гидридах металла капли могут формироваться в экспериментах с ударными волнами вблизи границы фазового перехода первого рода между металлической и молекулярной фазами. В пространственно-разделенной Ферми–Бозе смеси в интерференционном кольце Ааронова–Бома со сверхпроводящим мостиком в топологически нетривиальном состоянии возможно появление и коллапс дополнительных резонансов Фано, обусловленных присутствием в системе краевых майорановских мод.

DOI: 10.31857/S1234567823100075, EDN: cnbvlt

**I. Введение. Пространственно-разделенная Ферми–Бозе смесь и сверхпроводимость в оксидах висмута ВаКВіО<sub>3</sub>.** В статье [1] была впервые сформулирована идея пространственно-разделенной Ферми–Бозе смеси локальных бозон-

ных кластеров или комплексов (содержащих компактные электронные или дырочные пары) в матрице неспаренных (Ферми-жидкостных) состояний для объяснения механизма сверхпроводимости и природы электронного транспорта в нормальном состоянии в оксидах висмута ВаКВіО.

<sup>1)</sup>e-mail: kagan@kapitza.ras.ru

На рисунке 1 приведена схема локальной кристаллической структуры в плоскости  $\text{BiO}_2$  исходного соединения  $\text{BaBiO}_3$ , являющегося диэлектриком с волной зарядовой плотности (CDW) и с шахматной структурой распределения октаэдров  $\text{BiL}^2\text{O}_6$  и  $\text{BiO}_6$  (левый рисунок) и схема локальной кристаллической структуры  $\text{Ba}_{0.5}\text{K}_{0.5}\text{BiO}_3$  с диагональными цепочками комплексов  $\text{BiO}_6$ , внедренных в большой перколяционный кластер октаэдров  $\text{BiL}^2\text{O}_6$  (правый рисунок).

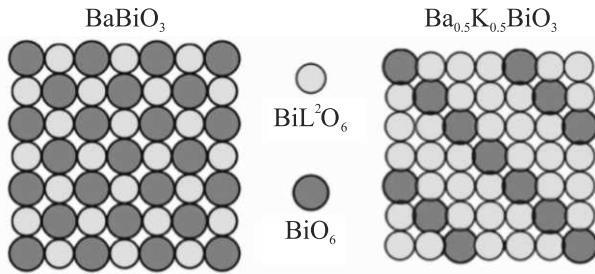


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема локальной кристаллической структуры в плоскости  $\text{BiO}_2$  исходного соединения  $\text{BaBiO}_3$ , являющегося CDW-изолятором с шахматной структурой распределения октаэдров  $\text{BiL}^2\text{O}_6$  и  $\text{BiO}_6$  (левый рисунок) и локальной кристаллической структуры  $\text{Ba}_{0.5}\text{K}_{0.5}\text{BiO}_3$  с диагональными цепочками комплексов  $\text{BiO}_6$ , внедренных в большой перколяционный кластер октаэдров  $\text{BiL}^2\text{O}_6$  (правый рисунок) [2]

Отметим, что возникновение дальнего порядка и макроскопической волновой функции сверхпроводящего состояния в  $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{BiO}_3$  обусловлено туннелированием локальных электронных пар из одного бозонного кластера  $\text{BiO}_6$  в соседний  $\text{BiO}_6$  кластер через туннельный барьер, образованный нормальными фермионными кластерами. Компоненты Ферми-Бозе смеси в интервале металлических концентраций  $0.37 < x < 0.5$  разделены в реальном пространстве, но не разделены в энергетическом пространстве (см. более детальное описание в [1] и [2]).

Отметим также, что формирование металлических ферромагнитных наночапель в немагнитных (парамагнитных, антиферромагнитных и зарядовоупорядоченных) диэлектрических матрицах в магнитных оксидах было подробно рассмотрено в [3].

**II. Капли параметра порядка в электронной системе малой плотности с притяжением в присутствии сильного случайного потенциала.** В работе [4] нами рассчитаны свойства двумерной электронной системы с малой электронной плотностью ( $n \ll 1$ ), сильным локальным притяжением Хаббарда на узле  $|U| > W$  ( $W$  – ширина зоны) в присутствии сильного случайного потенциала (диа-

гонального беспорядка)  $V$ , равномерно распределенного в диапазоне от  $-V$  до  $+V$ . Учитывались электронные прыжки только на соседние узлы квадратной решетки с шириной зоны  $W = 8t$ . Расчеты осуществлялись на решетке  $24 \times 24$  с периодическими граничными условиями.

В рамках подхода Боголюбова-де Жена наблюдалось появление неоднородных состояний пространственно-разделенной Ферми-Бозе смеси куперовских пар и неспаренных электронов с образованием бозонных сверхпроводящих капель разного размера в матрице непарных нормальных электронных состояний.

Нами также подробно проанализирована область параметров задачи (характеризуемых двумя важными отношениями  $|U|/W$  и  $V/W$ ), в которой при электронных плотностях  $n_C \approx 0.31$  начинается формирование большого перколяционного кластера и происходит переход изолятор-сверхпроводник [4, 5].

Отметим, что в численном моделировании наблюдался эффект уменьшения размера капли (от более крупных капель до отдельных би-электронных пар) при уменьшении электронной плотности до малых значений  $n \leq 0.1$  при фиксированных значениях притяжения Хаббарда  $U$  и случайного потенциала  $V$ .

Полученные результаты важны как для построения глобальной фазовой диаграммы в нашей системе, так и для понимания природы фазового перехода между сверхпроводящим, нормальным металлическим и локализованным (диэлектрическим) состоянием в квазидвумерном (тонкая пленка) грязном металле. В более практическом смысле полученные результаты интересны также для экспериментального построения сверхпроводящих флакс-кубитов в гранулированных сверхпроводниках, и, в частности, в гранулированных Al пленках.

В работе [4] расчет начинается со случайными значениями амплитуды спаривания  $\Delta_i$  и зависящей от узла перенормировки химического потенциала  $\tilde{\mu}_i$  на каждом из узлов, после чего выполнялась процедура численной диагонализации полученного гамильтониана. В результате были найдены собственные векторы  $u_n(\mathbf{r}_i)$ ,  $v_n(\mathbf{r}_i)$  и собственные значения  $E_n$  системы.

На рисунке 2 показано двумерное распределение электронной плотности (левый столбец), электронно-дырочного перемешивания (средний столбец) и параметра порядка (правый столбец) при  $n = 0.15$  на  $24 \times 24$  решетке с амплитудой беспорядка  $V/t = 10.0$ .

Подчеркнем, что хотя даже для малых электронных плотностей  $n \leq 0.1$  и больших амплитуд хаббардовского отталкивания  $|U|/t = 10$ , мы все еще



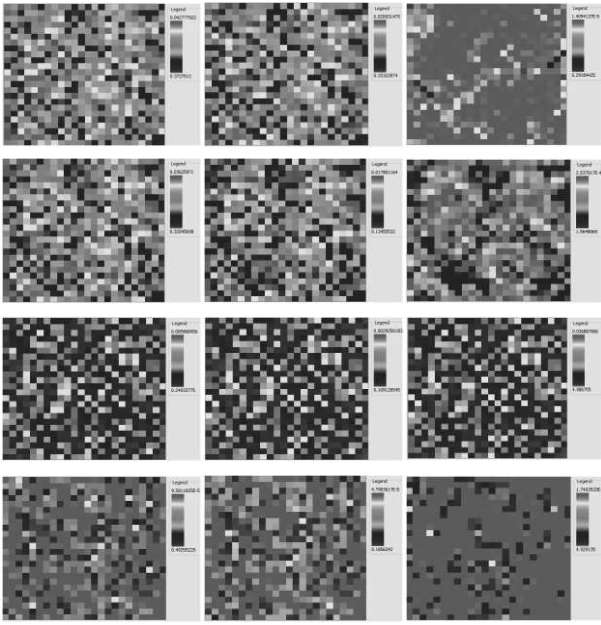


Рис. 2. (Цветной онлайн) Двумерное распределение электронной плотности (левый столбец), электронно-дырочного перемешивания (средний столбец) и параметра порядка (правый столбец) при  $n = 0.15$  на  $24 \times 24$  решетке с амплитудой беспорядка  $V/t = 10.0$

находимся в области БКШ для БКШ-БЭК кроссовера между протяженными куперовскими парами (область применимости теории Бардина-Купера-Шриффера) и локальными парами, образующими бозе-эйнштейновский конденсат (БЭК). Электронные пары при таких параметрах системы уже достаточно компактны, они слабо перекрываются и почти касаются друг друга. Таким образом, мы действительно очень близки к пределу, когда пары начинают “раздавливать” друг друга, т.е. к пределу Ферми-Бозе смеси компактных пар и неспаренных одиночных электронов. Кроме того, отметим, что по мере роста беспорядка пространственное распределение локальной амплитуды спаривания  $\Delta(r)$  сначала принимает форму отдельных капель, а затем при уменьшении плотности – отдельных биэлектронных пар.

**III. Неоднородные состояния в разбалансированных Ферми-Бозе смесях и квантовых газах.** С экспериментальной точки зрения, расслоение на фазы в разбалансированных (спин-поляризованных) ультрахолодных Ферми-газах впервые наблюдалось в работах группы Кеттерле [6]. В трехмерных ловушках в центре ловушки Кеттерле с соавторами детектировал парное состояние (бозе-конденсат составных бозонов с равными плотностями компонент  $n_{\uparrow} = n_{\downarrow}$ ), в то время как на периферии ловушки в основном сосредоточены

избыточные спины “вверх”. В квазиодномерных ловушках – ситуация обратная. Сбалансированные спаренные фермионы находятся на периферии, а избыточные спины “вверх” находятся в центре ловушки. Первые экспериментальные результаты по расслоению на фазы в квазидвумерных ловушках принадлежат группе Томаса [7]. Качественно ситуация в квазидвумерной геометрии напоминает трехмерную – со сбалансированными спаренными фермионами в центре ловушки.

В работе [8] были продолжены исследования разбалансированных ультрахолодных газов в режиме размерного кроссовера от квазиодномерных к трехмерным системам. Нами была решена задача о фазовой диаграмме в спин-поляризованном Ферми-газе с двумя компонентами для спинов “вверх” и “вниз” в случае притягательного взаимодействия на хаббардовских цепочках и лестницах с двумя и тремя ногами.

Результаты показывают значительное отличие хаббардовских цепочек с локальным притяжением на узле от лестниц с двумя и тремя ногами. При этом для двуногих и трехногих лестниц фазовая диаграмма (также, как и для лестниц с большим числом ног) содержит фазы сбалансированного Ферми-газа (ED) с локальными парами на узле и равным числом частиц для спинов “вверх” и “вниз”  $n_{\uparrow} = n_{\downarrow}$ , частично поляризованного Ферми-газа, для которого  $n_{\uparrow} > n_{\downarrow}$  (PP), и полностью (100%) поляризованного Ферми-газа (FP), для которого  $n_{\uparrow} = n$  и  $n_{\downarrow} = 0$ . Проведен анализ лестничных систем на устойчивость. Построение фазовой диаграммы осуществлялось в удобных осях химического потенциала  $\mu$  и магнитного поля  $h = n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$ .

Отметим, что в одномерных системах точное решение методом анзаца Бете подтверждает существование алгебраического порядка БКШ-типа в фазе с равными плотностями, в то время как частично поляризованная фаза является кандидатом для экспериментального наблюдения неоднородной сверхтекучести в фазе с параметром порядка типа Фулде-Ферреля-Ларкина-Овчинникова [9, 10], где сверхпроводящие корреляции убывают алгебраически в реальном пространстве и модулированы с характерной длиной, определяемой разницей импульсов Ферми для компонент “вверх” и “вниз”.

Построение фазовой диаграммы для лестничных систем проводилось на основе модели Хаббарда с притяжением для изотропного случая, отвечающего одинаковым значениям  $t_{\perp} = t_{\parallel}$  для перескоков на ближайшие узлы вдоль и поперек цепочек (вдоль “ног” и вдоль поперечных ступенек). При этом ана-

лизировались как пределы сильной связи  $|U| > W$ , так и слабой связи по отношению абсолютной величины взаимодействия к ширине одномерной зоны  $|U| < W = 4t$ .

Максимальное значение  $|U|/t$ , исследованное нами, равнялось 7. Вычисления проводились методами точной диагонализации DMRG (*density matrix renormalization group*) для энергии основного состояния системы при температуре  $T = 0$ . Потенциал конфайнмента ловушки учитывался по методу Томаса–Ферми с помощью замены магнитного поля  $h$  на  $h - V(x)$  и фактически соответствовал вертикальному наклону линий границы фаз на фазовой диаграмме.

Некоторые аспекты фазовой диаграммы представляются нам достаточно интересными и важными, в частности, нетривиальные границы и немонотонные линии на фазовой диаграмме между фазами с частичной поляризацией и равными числами частиц в случае двуногих и трехногих лестниц. Этот эффект становится особенно интересен в окрестности мультикритической точки  $O$  на фазовой диаграмме.

Отрицательный наклон линии границы между этими двумя фазами  $d\mu/dh < 0$  для хаббардовской цепочки иллюстрирует тот факт, что в одномерной системе частично поляризованная фаза соответствует центральной части облака газа, а фаза с равными плотностями спинов либо находится на периферии, либо отсутствует вовсе. В то же время для лестниц с двумя и тремя ногами наклон этой линии становится положительным  $d\mu/dh > 0$ , и теперь уже спин-поляризованная фаза находится на периферии ловушки как в экспериментах Кеттерле [38], в то время как фаза с равными плотностями спинов находится в центре ловушки.

На рисунке 3 изображена фазовая диаграмма модели Хаббарда с притяжением для лестниц с различным числом связанных цепочек (“ног”  $w$ ): (a) – с одной ногой  $w = 1$ ; (b) – двумя ногами  $w = 2$ ; (c) – тремя ногами  $w = 3$ , – для значений хаббардовского притяжения на узле  $U = -7t$ . Мы показываем только ту часть фазовой диаграммы, для которой  $\mu < U/2$ ,  $h > 0$ , поскольку ее другая часть  $h < 0$ , симметрична относительно замены  $h \rightarrow -h$ , и аналогично часть фазовой диаграммы, где  $\mu > U/2$  симметрична показанной части фазовой диаграммы с  $\mu < U/2$  благодаря симметрии между частицами и дырками. Сплошные линии – результат численных расчетов. Длина каждой из ног лестницы  $L = 40$  [8]. ED – equal density phase (фаза с равными плотностями спинов вверх и вниз  $n_\uparrow = n_\downarrow$ ); PP – partially polarized phase (частично поляризованная фаза с плотностями  $n_\uparrow > n_\downarrow$ ); FP – fully polarized phase (полностью поляризованная фаза  $n_\downarrow = 0$ ).

**IV. Задачи разлета и коллапса квантовых газов.** В работах [11–13] нами исследована задача о расширении классических и квантовых газов в ваку-

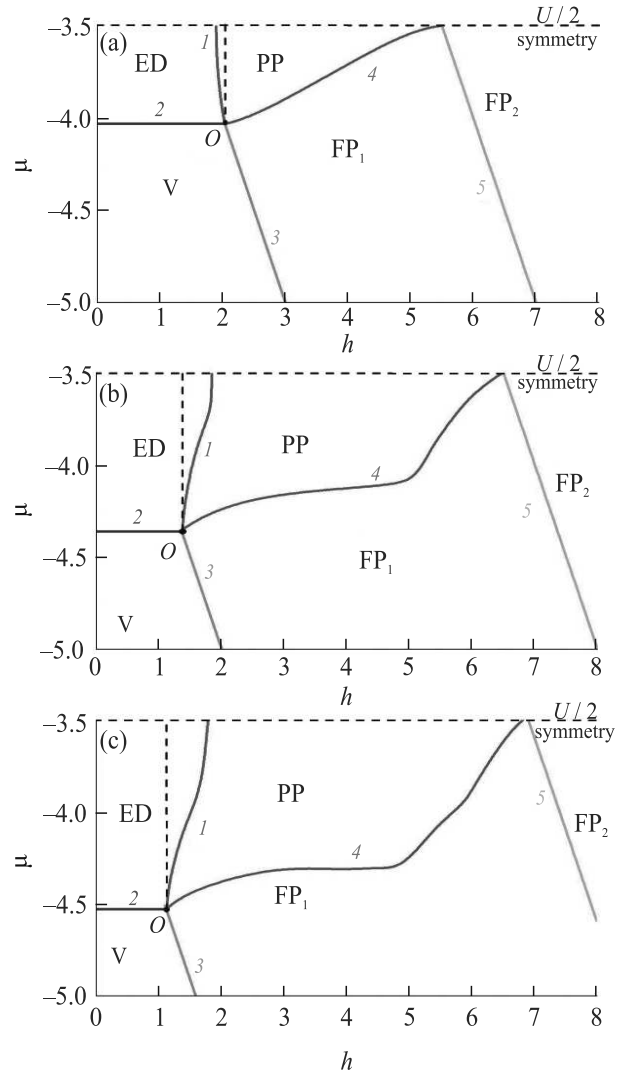


Рис. 3. (Цветной онлайн) Глобальная фазовая диаграмма модели Хаббарда с притяжением для лестниц с различным числом “ног”  $w$ : (a) – с одной ногой  $w = 1$ ; (b) – двумя ногами  $w = 2$ ; (c) – тремя ногами  $w = 3$ , – для значений хаббардовского притяжения на узле  $U = -7t$ . Мы показываем только ту часть фазовой диаграммы, для которой  $\mu < U/2$ ,  $h > 0$ , поскольку ее другая часть  $h < 0$ , симметрична относительно замены  $h \rightarrow -h$ , и аналогично часть фазовой диаграммы, где  $\mu > U/2$  симметрична показанной части фазовой диаграммы с  $\mu < U/2$  благодаря симметрии между частицами и дырками. Сплошные линии – результат численных расчетов. Длина каждой из хаббардовских цепочек (ног лестницы)  $L = 40$  [8]. ED – equal density phase (фаза с равными плотностями спинов вверх и вниз  $n_\uparrow = n_\downarrow$ ); PP – partially polarized phase (частично поляризованная фаза с плотностями  $n_\uparrow > n_\downarrow$ ); FP – fully polarized phase (полностью поляризованная фаза  $n_\downarrow = 0$ ).

ум на основе симметричного подхода. Для квантовых газов в приближении Гросса–Питаевского [14, 15] до-

полнительные симметрии возникают для газов с химическим потенциалом  $\mu$ , зависящим от плотности  $n$  степенным образом с показателем  $\nu = 2/D$ , где  $D$  – размерность пространства. Для газовых конденсатов бозе-атомов при температурах  $T \rightarrow 0$  эта симметрия возникает для двумерных систем. При  $D = 3$  и, соответственно,  $\nu = 2/3$  такая ситуация реализуется для сильно взаимодействующего Ферми-газа при низких температурах в унитарном пределе [14]. Эта же симметрия для классических газов в трехмерной геометрии возникает для одноатомных газов с показателем адиабаты  $\gamma = 5/3$ .

Оба эти факта были обнаружены в 1971 г. независимо Талановым [16] для двумерного нелинейного уравнения Шредингера (совпадающего с уравнением Гросса–Питаевского [14, 15]), описывающего стационарную самофокусировку света в средах с керровской нелинейностью, а для классических газов – Анисимовым и Лысыковым [17]. В квазиклассическом пределе уравнение Гросса–Питаевского совпадает с уравнениями гидродинамики идеального газа с показателем адиабаты  $\gamma = 1 + 2/D$ .

Автомодельные решения в этом приближении описывают на фоне расширяющегося газа угловые деформации газового облака в рамках уравнений типа Ермакова [18]. Такого рода изменения формы расширяющегося облака наблюдаются в многочисленных экспериментах как при разлете газа после воздействия мощного лазерного излучения, например, на металл, так и при разлете квантовых газов в вакуум.

В экспериментах [19] наблюдалось автомодельное расширение сильно взаимодействующего Ферми-газа из ловушки сигарообразной формы. На рисунке 4, взятом из [19], представлены изображения расширяющегося Ферми-газа.

В начальный момент времени газовое облако имело форму сильно вытянутого эллипсоида в виде сигары (время  $t = 100$  мкс), затем при  $t = 600$  мкс почти сферическую форму и на конечной стадии облако имело форму диска. Общее время наблюдения было 2000 мкс, которое можно взять в качестве полупериода (или меньше) для угловых осцилляций формы газового облака,  $t \leq t_{\text{osc}}/2$ . Все эти стадии качественно отвечают автомодельному решению. При этом результаты измерений среднего размера как функции времени для разных значений обратного газового параметра  $1/(a_s k_F)$  с хорошей точностью представляют собой параболические зависимости, в полном соответствии с соотношением для среднего квадрата радиуса  $R^2$  облака, следующим из теоремы вириала [20]:

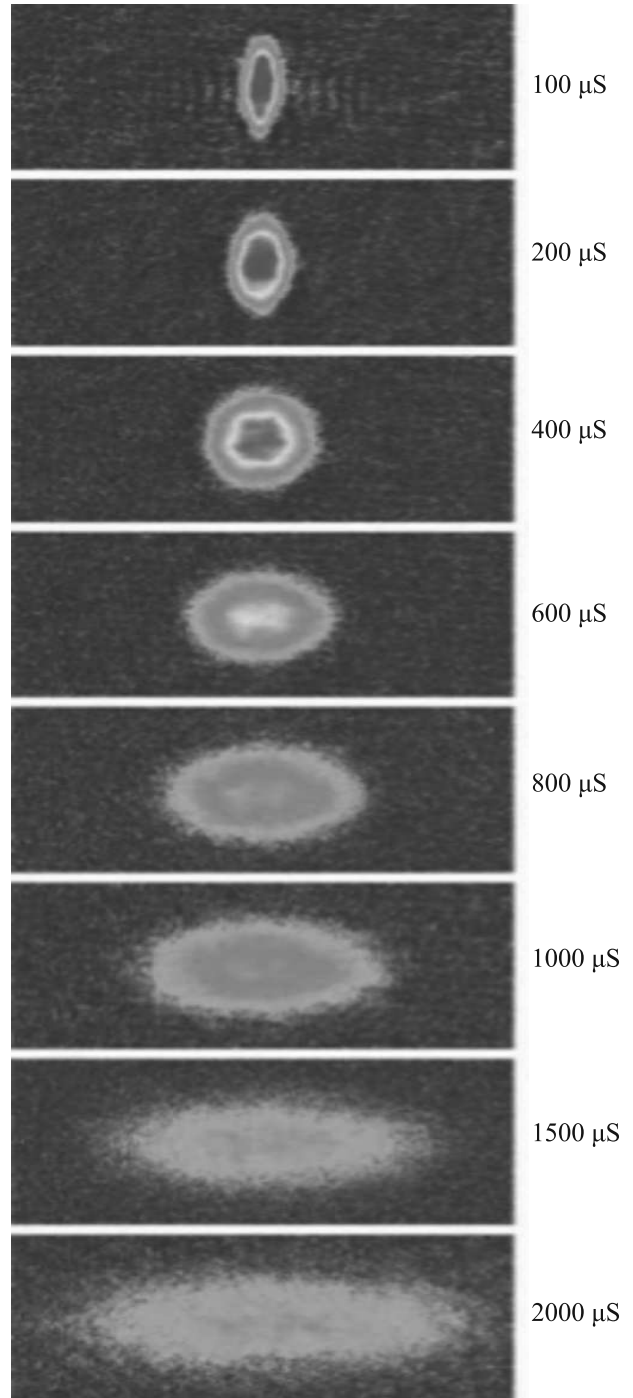


Рис. 4. (Цветной онлайн) Изображения расширяющегося сильно-взаимодействующего Ферми-газа во времени (в мкс). Начальная форма в виде сигары [19]. Далее, сферическая форма и плоская цилиндрически-симметричная форма в виде блина

$$2mN \frac{d^2(R^2)}{dt^2} = 4E.$$

Здесь  $2m$  – удвоенная за счет куперовского спаривания масса Ферми-атомов,  $N$  – полное число частиц,

$E$  – полная энергия. Интегрирование этого соотношения дает

$$2mNR^2 = 2m \int r^2 n d\mathbf{r} = 2mNR^2 = 2Et^2 + C_1 t + C_2, \quad (1)$$

где плотность  $n = |\Psi|^2$ ,  $\Psi$  – волновая функция конденсата,  $C_1$ ,  $C_2$  – два дополнительных интеграла движения. Отсюда следует, что асимптотически при больших  $t$  средний размер облака квантового газа, расширяющегося в вакуум, растет линейно со временем, т.е. имеет место выход на баллистический режим.

Как показано в работах [11–13], уравнение Гросса–Питаевского при степенной зависимости  $\mu$  от плотности  $n$  с показателем  $\nu = 2/D$  в квазиклассическом приближении допускает точные трехмерные автомодельные решения, описывающие анизотропный разлет газа в вакуум. В безразмерных переменных плотность через автомодельные переменные  $\xi_i = x_i/a_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) задается в виде

$$n = \frac{1}{a_x a_y a_z} f(\xi),$$

где три скейлинговых параметра  $a_i$  являются функциями времени  $t$ . При этом  $f(\xi)$  оказывается сферически-симметричной функцией, зависящей только от модуля  $|\xi|$  и положительной константы  $\lambda$ , определяемой из начальных условий:

$$f(\xi) = \left[ 1 - \frac{3\lambda}{10} \xi^2 \right]^{3/2},$$

и обращается в нуль при  $|\xi| > \sqrt{\frac{10}{3\lambda}}$ .

Поведение скейлинговых параметров от времени определяется из решений уравнений Ньютона

$$\ddot{a}_i = -\frac{\partial U}{\partial a_i}, \quad U(a) = \frac{3\lambda}{2(a_x a_y a_z)^{2/3}}. \quad (2)$$

Эти уравнения относятся к так называемым системам ермаковского типа [18] и интегрируются благодаря сохранению энергии

$$E = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{a}}^2 + U(a). \quad (3)$$

и соотношению (1), где  $R^2 = 3a^2$  и потенциал

$$U(a) = 3\lambda/2a^2. \quad (4)$$

В сферически-симметричном случае, когда энергия зависит от модуля  $|\mathbf{a}| = a$ , решение тривиально находится. Размер облака  $r$  при  $t \rightarrow \infty$  растет линейно, соответственно скорость разлета на больших

временах стремится к постоянной величине (баллистический режим), в размерных переменных равной:

$$v_\infty = \sqrt{E/mN}.$$

Необходимо отметить, что в случае коллапса [21–23] выражение для квадрата радиуса облака, следующего из вириальной теоремы, обращается в нуль в некоторый момент времени  $t = t_0$  (достаточным условием этого является отрицательность  $H$ ). Отсюда немедленно следует, что при приближении к  $t = t_0$  размер облака

$$R \propto (t_0 - t)^{1/2},$$

что отвечает режиму слабого автомодельного коллапса (см. [21, 22]).

Для анализа деформаций формы облака на фоне расширяющегося газа (рис. 4) необходимо в (3) перейти к сферическим координатам: модулю  $a$  и сферическим углам  $\varphi$  и  $\phi$ . Благодаря теореме вириала (1), движение по радиусу отщепляется, а угловая динамика определяется эффективным потенциалом:

$$U = \frac{3\lambda}{2^{1/3} (\cos^2 \phi \sin \phi \sin 2\varphi)^{2/3}} \cdot \frac{1}{3a^2}.$$

Минимум этого потенциала  $\min U = \frac{3\lambda}{2a^2}$  достигается при

$$\sin \phi = 1/\sqrt{3}, \quad \varphi = \pi/4, \quad (5)$$

соответствует сферически симметричному распределению в (4). Вторые производные от  $U$  по угловым переменным в точке минимума определяют главные частоты осцилляций. В автомодельном приближении они оказываются одинаковыми и равными:

$$\Omega_1^2 = \Omega_2^2 = 18\lambda.$$

В заключение данного раздела подчеркнем, что формирование больших бозонных капель (содержащих 5 и более частиц) в магнитных и оптических ловушках характерно для разбалансированных Ферми–Бозе смесей изотопов щелочных элементов Li-6 (фермионы)–Li-7 (бозоны) и K-40 (фермионы)–Rb-87 (бозоны), когда бозонная плотность больше фермионной:  $n_B > n_F$  (см. [24]), а также в бозе-газах с резонансным притяжением между бозонами. Большие бозонные капли в случае сильного разбаланса между компонентами  $n_B \gg n_F$  были экспериментально детектированы в Ферми–Бозе смеси K-40–Rb-87 с большим преобладанием бозонов в работах группы Модуно [25]. Исчезновение пороговым образом (по числу бозонов в ловушке) локального минимума в бозонной энергии и вследствие этого коллапс в

бозонной подсистеме в разбалансированной Ферми–Бозе смеси с преобладанием бозонов,  $N_B > N_F$ , притяжением между фермионами и бозонами была подробно проанализирована в теоретических работах [26, 27].

В сбалансированной Ферми–Бозе смеси с равными плотностями компонент  $n_B = n_F$  возможно также образование составных фермионов  $f_\sigma b$  и четверок  $f_\uparrow b f_\downarrow b$  из двух фермионов с противоположными проекциями спина и двух бозонов [28, 29] и [30, 31]. Большие бозонные капли также были экспериментально обнаружены в бозе-газе Dy-164 с сильным диполь–дипольным притяжением [32].

**V. Длинноволновые осцилляции заряда в  $\text{MgB}_2$ . Акустические плазмоны. Неоднородные состояния в плазменных системах.** Поставлена и качественно решена задача об эффективном экранированном кулоновском взаимодействии в слоистом металле  $\text{MgB}_2$  со спектром акустического плазмона  $\omega_{ac}^2 = B \sin^2(q_z d)$  в направлении  $z$  перпендикулярном слоям (см. рис. 5 и [33]). Как хорошо видно из рис. 5, спектр практически линейен в окрестностях точек  $q_z d \rightarrow n\pi$ , где  $n = 0, 1, \dots$ ;  $d$  – межплоскостное расстояние.

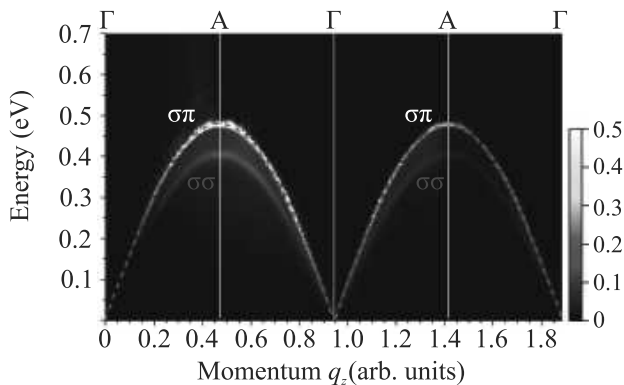


Рис. 5. (Цветной онлайн) Спектр акустического плазмона  $\omega_{ac}^2 = B \sin^2(q_z d)$  в слоистом металле  $\text{MgB}_2$  в направлении  $z$ , перпендикулярном базальной плоскости [33]. Спектр практически линейен в окрестностях точек  $q_z d \rightarrow n\pi$ , где  $n = 0, 1, \dots$ ;  $d$  – межплоскостное расстояние

В этом случае эффективное взаимодействие в импульсном пространстве имеет особенность на малых частотах в резонансе с частотой акустического плазмона и конечных волновых векторах  $q_z = (Q = \pi/d)$  равных вектору “нестинга”  $Q$ . В импульсном пространстве эта особенность имеет вид  $V_{\text{eff}} \propto 1/|q_z - Q|$ .

Если мы аккуратно перейдем в координатное пространство, то увидим, что возникает сингулярная (осциллирующая) часть эффективного взаимодей-

ствия в реальном пространстве, спадающая степенным образом по закону  $\cos(Qz)/(Qz)^2$ . Такой квадратичный характер спада напоминает фриделевские осцилляции при экранировке заряда в 2D металле [34].

Интересной задачей на будущее является задача о возможности бозе–эйнштейновской конденсации и сверхтекучести в слабо-неидеальных бogoлюбовских газах акустических плазмонов при отталкивательном характере потенциала плазмон–плазмонного взаимодействия и задача об их коллапсе в реальном пространстве при притягательном знаке этих взаимодействий.

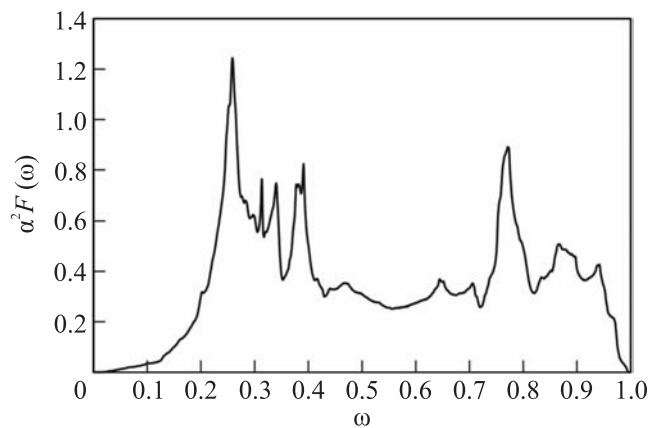


Рис. 6. Фононная функция Элиашберга для фазы  $I_{41}/amd$  металлического водорода под давлением 500 ГПа [38]

**VI. Сверхпроводимость и формирование капель в металлическом водороде и гидридах металлов.** Сверхпроводимость в однородных фазах металлического водорода и металло-гидридов мы рассчитывали в рамках модифицированной нами схемы интегральных уравнений Элиашберга на мнимой оси с учетом поправок на химический потенциал [5, 35]. Отметим, что численные методы решения системы уравнений Элиашберга также ранее разрабатывались в [36–40]. На рисунке 6 приведена функция Элиашберга фононного спектра для одной из фаз металлического водорода под давлением.

Зависимость параметра порядка от температуры показана на рис. 7. Хотя для этой фазы металлического водорода разница между результатами, полученными с поправкой на химический потенциал электронов [5, 35] и ранее без нее [38], невелика, для других веществ она может быть весьма существенной. Однако следует отметить, что учет поправки на химический потенциал электронов приводит к резкому

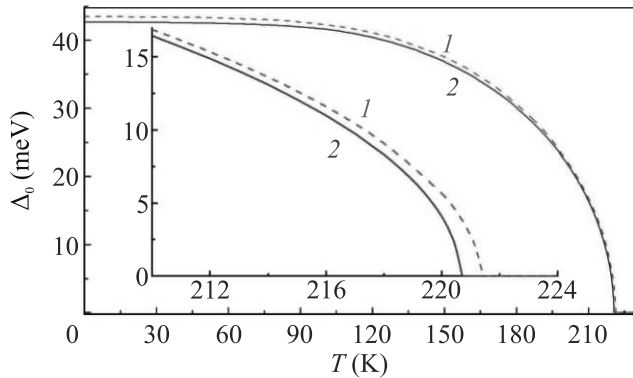


Рис. 7. (Цветной онлайн) Зависимость параметра порядка от температуры  $\Delta(T)$  для фазы  $I_{41}/amd$  металлического водорода при давлении 500 ГПа (1 – расчеты с поправкой на химический потенциал электронов, 2 – без поправки [35]). На вставке показан увеличенный фрагмент графика вблизи температуры сверхпроводящего перехода

(в нашем случае на 2 порядка) увеличению времени расчета.

Аналогичные результаты для других соединений на основе водорода при высоких давлениях получены в работе [41]. Для всех веществ, для которых в этой работе приведены функции Элиашберга, мы рассчитывали  $T_c$  двумя методами (см. табл. 1): с использованием алгоритма Аллена–Дайнса [42–44] (столбец “A-D-1”) и методом решения уравнений Элиашберга вида [5, 35] (столбец “El-1”). Значения  $T_c$ , полученные в [41] с использованием модифицированного уравнения Макмиллана [42] в приближении Аллена–Дайнса и путем решения уравнений Элиашберга, также приведены в таблице (столбцы “A-D-2” и “El-2”).

**Таблица 1.** Температуры сверхпроводящего перехода некоторых гидридов при высоких давлениях

Вещество	$P$ (ГПа)	$T_c$ (К)			
		A-D-1	A-D-2	El-1	El-2
LaBeH <sub>8</sub>	50	194	167	192	191
LaBH <sub>8</sub>	70	160	144	159	160
LaAlH <sub>8</sub>	100	145	130	145	144
CaBeH <sub>8</sub>	210	307	254	303	302
CaBH <sub>8</sub>	100	241	212	239	238
YBeH <sub>8</sub>	100	250	215	248	249
SrBH <sub>8</sub>	150	206	163	204	200

Как видно из табл. 1, во-первых, результаты наших расчетов и авторов работы [41] в основном совпадают с точностью до 1 К (расхождение, очевидно, связано с ошибкой оцифровки графиков функций Элиашберга, приведенных в статье). Во-вторых,

расчеты по алгоритму Аллена–Дайнса в данном случае дают очень хорошее приближение к температуре сверхпроводящего перехода (для большинства материалов не хуже 2 К). Наоборот, использование модифицированного уравнения Макмиллана в приближении Аллена–Дайнса дает занижение  $T_c$  на несколько десятков градусов.

**Образование металлических капель вблизи границы фазового перехода первого рода между металлическим и молекулярным водородом.** В качестве естественного обобщения результатов, представленных в работе, мы планируем расширить нашу модель для уравнений Элиашберга, чтобы учесть влияние примесей, многозонный характер исследуемых соединений [3, 5, 35], а также возможность образования неоднородных состояний (образование капель), возникающих при приближении к фазовому переходу первого рода между жидким и кристаллическим металлическим водородом.

Мы планируем учесть также возможность образования в системе двух бозе-конденсатов, первый из которых представляет собой бозе-конденсат куперовских пар в электронной подсистеме, а второй – бипротонный бозе-конденсат в ионной компоненте (подобно ситуации в нейтронных звездах). Качественные соображения о возможности сосуществования двух бозе-конденсатов куперовских пар и бипротонов в низкоразмерных фазах металлического водорода (таких как планарная и нитевидная фаза [24, 45]) были сформулированы нами в [46, 47].

Рассмотрим теперь возможность образования капель в металлическом водороде. На рисунке 8 приведена  $T-P$  фазовая диаграмма молекулярного и атомарного металлического водорода при высоких давлениях. Фазовая диаграмма содержит 4 фазы молекулярного и металлического водорода, а именно 2 фазы твердого (кристаллического) молекулярного и металлического водорода при высоких давлениях и низких температурах и две фазы жидкого молекулярного и металлического водорода при высоких давлениях и высоких температурах [48].

При этом фазовый переход из кристаллической в жидкую фазу как для атомарного металлического водорода, так и для молекулярного (диэлектрического) водорода является фазовым переходом первого рода, для которого характерно образование неоднородных капельных структур. Отметим, что образование жидких капель и маленьких “льдинок” вокруг положительных и отрицательных ионов хорошо известно в физике жидкого и твердого гелия [49]. Аналогично, можно ожидать формирование капель металлического водорода в диэлектрической матрице

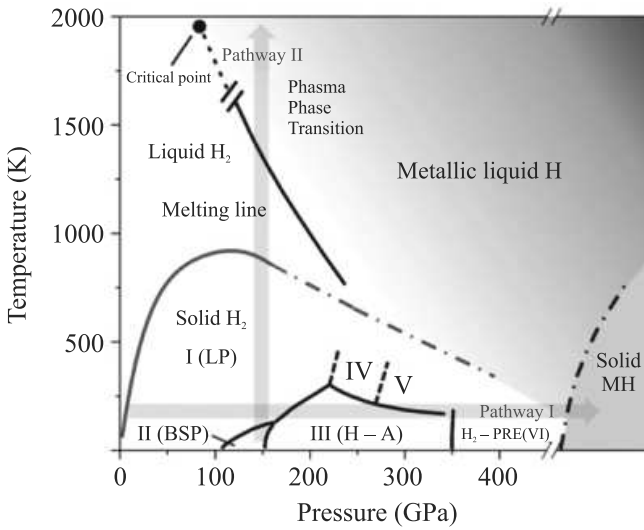


Рис. 8. (Цветной онлайн)  $T - P$  фазовая диаграмма молекулярного и атомарного металлического водорода при высоких давлениях. Фазовая диаграмма вблизи фазовой границы между молекулярным и металлическим водородом содержит 4 существенные для нас фазы, а именно 2 фазы твердого (кристаллического) молекулярного и металлического водорода при высоких давлениях и низких температурах и две фазы жидкого молекулярного и металлического водорода при высоких давлениях и высоких температурах [48]

молекулярного водорода. Экспериментальным подтверждением этой идеи являются эксперименты с ударными волнами [50] для дейтериевых систем.

**VII. Коллапс резонанса Фано в кольце Ааронова–Бома [51] с топологическим сверхпроводящим мостиком как тест на не-локальность майорановских мод.** Идеи пространственно-разделенных Ферми и Бозе систем и нетривиальной сверхпроводимости, наведенной в них, могут быть реализованы и в ограниченной геометрии микроконтакта с 2 или 4 квантовыми точками [52–54].

В геометрии ромба, показанной на рис. 9 с 4 квантовыми точками, два фермиевских рукава (фактически, две эффективные фермиевские зоны) которого, описываемые туннельными гамильтонианами для фермиевских квазичастиц, соединены сверхпроводящим мостиком, содержащим парные бозонные состояния [55–57]. При этом в сверхпроводящем мостике может наводиться топологически нетривиальная сверхпроводимость [55].

В этом контексте совместно с С. В. Аксеновым [57] в 2020 г. решена задача о коллапсе узкого резонанса Фано [58] в контактансе системы вследствие нелокальности майорановского состояния [59]. Подчерк-

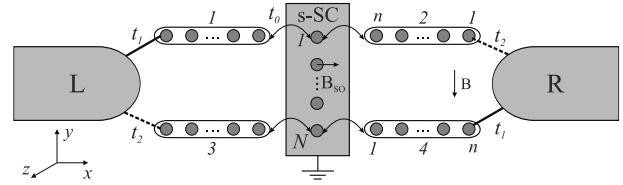


Рис. 9. (Цветной онлайн) Кольцо Ааронова–Бома [51] со сверхпроводящим мостиком в топологически нетривиальном состоянии с асимметрией туннельных параметров между рукавами кольца и контактами. Кольцо Ааронова–Бома используется в качестве интерференционного устройства для наблюдения резонансов Фано [58]

нем, что одна из главных особенностей майорановских состояний, привлекающая большой интерес к этим возбуждениям в твердотельных системах, заключается в их нелокальном характере.

В [57] нами рассмотрено интерференционное устройство в виде асимметричного кольца Ааронова–Бома, рукава которого соединены поперечным мостиком в виде одномерного топологического сверхпроводника. Асимметричность устройства заключается в неодинаковости параметров туннелирования  $t_1$  и  $t_2$  между контактами и двумя рукавами кольца.

Показано, что в отличие от рассмотренной нами в [56] симметричной геометрии, в контактансе асимметричного устройства возникают новые резонансы Фано. Обнаружено, что их ширина пропорциональна величине нелокального состояния сверхпроводника с минимальной энергией, равной энергии связи пары краевых майорановских возбуждений.

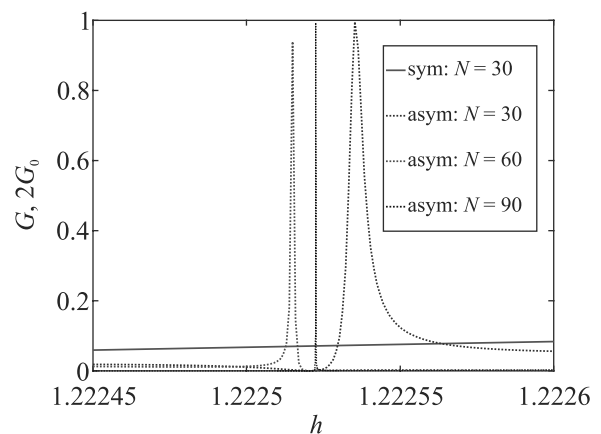


Рис. 10. (Цветной онлайн) Коллапс узкого резонанса Фано с увеличением степени нелокальности майорановских мод в сверхпроводящем мостике

Другими словами, можно сказать, что чем сильнее плотность вероятности концентрируется на кра-

ях, тем уже резонанс Фано. В результате, в предельном случае двух невзаимодействующих майорановских фермионов (очень большой длины топологического сверхпроводящего мостика) данная особенность кондактанса исчезает (см. рис. 10).

Это утверждение может быть проиллюстрировано в рамках бесспиновой модели кольца [57], в роли мостика для которой используется майорановская цепочка Китаева [60] с четным числом узлов. При этом показано, что обнаруженный эффект связан с увеличением кратности вырождения структуры с нулевой энергией в особой точке модели Китаева и уменьшением перекрытия волновых функций майорановских фермионов при увеличении числа узлов (фактически длины) цепочки, что и приводит к коллапсу узкого резонанса Фано.

Дополнительное рассмотрение частного случая интерферометра, включающего только его половину (например, когда сверхпроводящий мостик на рис. 9 связан только с левыми проволоками), показало, что перекрытие майорановских волновых функций, образующих блоголюбское возбуждение с нулевой энергией, приводит к удвоению периода осцилляций Ааронова-Бома [61].

**IX. Заключение.** В обзоре в рамках пространственно-разделенной Ферми-Бозе смеси мы описали ряд сверхпроводящих и сверхтекучих систем, в которых возможно формирование капель или кластеров параметра порядка в матрицах нормальных неспаренных состояний. Эти системы включают в себя сверхпроводящие оксиды висмута ВаКВiO, разбалансированные Ферми-газы и Ферми-Бозе смеси в магнитных ловушках, двумерные системы с малой электронной плотностью, описываемые 2D моделью Хаббарда с сильным локальным притяжением на узле и сильным диагональным беспорядком. Образование капель также характерно для коллапсирующих экситонных [62] и плазмонных систем с притягательным знаком экситон-экситонного и плазмон-плазмонного взаимодействия, а также для металлического водорода в экспериментах с ударными волнами вблизи границы фазового перехода первого рода между жидкой и кристаллической фазами. Полученные в обзоре результаты могут быть полезны для приложений в сверхпроводящей наноэлектронике и реализации сверхпроводящих кубитов в гранулированных средах.

Авторы выражают благодарность Российскому фонду фундаментальных исследований за поддержку в рамках гранта # 20-02-00015.

М. Ю. Каган благодарен программе поддержки фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

1. A. P. Menushenkov, K. V. Klementev, A. V. Kuznetsov, and M. Yu. Kagan, *ЖЭТФ* **120**, 700 (2001).
2. A. P. Menushenkov, A. V. Kuznetsov, K. V. Klementiev, and M. Yu. Kagan, *J. Supercond. Nov. Magn.* **29**, 701 (2016).
3. M. Yu. Kagan, K. I. Kugel, and A. L. Rakhmanov, *Phys. Rep.* **916**, 1 (2021).
4. М. Ю. Каган, Е. А. Мазур, *ЖЭТФ* **159**, 696 (2021).
5. E. A. Mazur, R. Sh. Ikhsanov, and M. Yu. Kagan, *J. Phys. Conf. Ser.* **2036**, 012019 (2021).
6. Y. Shin, M. W. Zwierlein, C. H. Schunck, A. Schirotzek, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 030401 (2006).
7. W. Ong, C. Cheng, I. Arakelyan, and J. E. Thomas, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 110403 (2015).
8. E. A. Burovski, R. Sh. Ikhsanov, A. A. Kuznetsov, and M. Yu. Kagan, *J. Phys. Conf. Ser.* **1163**, 012046 (2019).
9. P. Fulde and R. A. Ferrell, *Phys. Rev. A* **135**, 550 (1964).
10. А. И. Ларкин, Ю. Н. Овчинников, *ЖЭТФ* **47**, 1136 (1964).
11. E. A. Kuznetsov, M. Yu. Kagan, and A. V. Turlapov, *Phys. Rev. A* **101**, 041612 (2020).
12. Е. А. Кузнецов, М. Ю. Каган, *ТМФ* **202**, 458 (2020).
13. Е. А. Кузнецов, М. Ю. Каган, *ЖЭТФ* **159**, 794 (2021).
14. Л. П. Питаевский, *УФН* **178**, 633 (2008).
15. E. P. Gross, *Nuovo Cimento* **20**, 454 (1961).
16. В. И. Таланов, *Письма в ЖЭТФ* **11**, 303 (1971).
17. С. И. Анисимов, Ю. И. Лысыков, *ПММ* **34**, 926 (1970).
18. В. П. Ермаков, *Дифференциальные уравнения второго порядка. Условия интегрируемости в конечном виде. Из лекций по интегрированию дифференциальных уравнений* Универ. тип., Киев (1880).
19. K. M. O'Hara, S. L. Hemmer, M. E. Gehm, S. R. Granade, and J. E. Thomas, *Science* **298**, 2179 (2002).
20. С. Н. Власов, В. А. Петрищев, В. И. Таланов, *Изв. вузов. Радиофизика* **14**, 1353 (1971).
21. В. Е. Захаров, Е. А. Кузнецов, *ЖЭТФ* **91**, 1310 (1986).
22. В. Е. Захаров, Е. А. Кузнецов, *УФН* **182**, 569 (2012).
23. В. Е. Захаров, *ЖЭТФ* **62**, 1745 (1972).
24. Е. Г. Бровман, Ю. Каган, А. Холас, В. В. Пушкарев, *Письма в ЖЭТФ* **18**, 269 (1973).
25. G. Modugno, G. Roati, F. Riboli, F. Ferlaino, R. J. Brecha, and M. Inguscio, *Science* **297**, 2240 (2002).
26. S. T. Chui and V. N. Ryzhov, *Phys. Rev. A* **69**, 043607 (2004).
27. S. T. Chui, V. N. Ryzhov, and E. E. Tareyeva, *Письма в ЖЭТФ* **80**, 305 (2004).
28. M. Yu. Kagan, I. V. Brodsky, D. V. Efremov, and A. V. Klaptsov, *Phys. Rev. A* **70**, 023407 (2004).



29. М. Ю. Каган, А. В. Клапцов, И. В. Бродский, R. Combescot, X. Leyronas, УФН **176**, 1105 (2006).
30. A. V. Turlapov and M. Yu. Kagan, J. Phys. Condens. Matter **29**, 383004 (2019).
31. М. Ю. Каган, А. В. Турлапов, УФН **189**, 225 (2019).
32. I. F. Barbur, H. Kadan, F. Schmit, M. Wenzel, and T. Pfau, Phys. Rev. Lett. **116**, 215301 (2016).
33. V. M. Silkin, A. Balassis, P. M. Eschenique, and E. V. Chulkov, Phys. Rev. B **80**, 054521 (2009).
34. М. Ю. Каган, В. А. Мицкан, М. М. Коровушкин, УФН **185**, 785 (2015).
35. Р. Ш. Ихсанов, Е. А. Мазур, М. Ю. Каган, Изв. Уфимского научного центра РАН **1**, 49 (2023).
36. R. Szczesniak, Acta Phys. Pol. A **109**, 179 (2006).
37. A. P. Durajski, Sci. Rep. **6**, 38570 (2016).
38. Н. А. Кудряшов, А. А. Кутуков, Е. А. Мазур, Письма в ЖЭТФ **104**, 488 (2016).
39. I. A. Kruglov, D. V. Semenov, H. Song, R. Szczesniak, I. A. Wrona, R. Akashi, E. M. M. Davari, D. Duan, C. Tian, A. G. Kvashnin, and A. R. Oganov, Phys. Rev. B **101**, 024508 (2020).
40. O. V. Dolgov, R. K. Kremer, J. Kortus, A. A. Golubov, and S. V. Shulga, Phys. Rev. B **72**, 024504 (2005).
41. Z. Zhang, T. Cui, M. J. Hutcheon, A. M. Shipley, H. Song, M. Du, V. Z. Kresin, D. Duan, C. J. Pickard, and Y. Yao, Phys. Rev. Lett. **128**, 047001 (2022).
42. P. B. Allen and R. C. A. Dynes, Phys. Rev. B **12**, 905 (1975).
43. F. Marsiglio and J. P. Carbotte, in *Superconductivity. Conventional and Unconventional Superconductors*, Springer: Berlin (2008), v. 1, p. 73.
44. J. P. Carbotte, Rev. Mod. Phys **62**, 1027 (1990).
45. Е. Г. Бровман, Ю. Каган, А. Холас, ЖЭТФ **61**, 2429 (1972).
46. М. Ю. Каган, Письма в ЖЭТФ **103**, 822 (2016).
47. M. Yu. Kagan and A. Bianconi, Condens. Matter **4**, 51 (2019).
48. M. Houtput, J. Tempere, and I. F. Silvera, Phys. Rev. B **100**, 134106 (2019).
49. И. М. Халатников, *Введение в теорию сверхтекучести*, Наука, М. (1965).
50. M. D. Knudson, M. P. Desjarlais, A. Becker, R. W. Lemke, K. R. Cochrane, M. E. Savage, D. E. Bliss, T. R. Mattsson, and R. Redmer, Science **348**, 1455 (2015).
51. Y. Aharonov and D. Bohm, Phys. Rev. **115**, 485 (1959).
52. M. Yu. Kagan, V. V. Val'kov, and S. V. Aksenov, Phys. Rev. B **95**, 035411 (2017).
53. M. Yu. Kagan, V. V. Val'kov, and S. V. Aksenov, JMMM **440**, 15 (2017).
54. М. Ю. Каган, С. В. Аксенов, Письма в ЖЭТФ **107**, 512 (2018).
55. В. В. Вальков, М. С. Шустин, С. В. Аксенов, А. О. Злотников, А. Д. Федосеев, В. А. Мицкан, М. Ю. Каган, УФН **192**, 3 (2022).
56. S. V. Aksenov, M. Yu. Kagan, and V. V. Val'kov, J. Phys. Condens. Matter **31**, 225301 (2019).
57. С. В. Аксенов, М. Ю. Каган, Письма в ЖЭТФ **111**, 391 (2020).
58. U. Fano, Phys. Rev. **124**, 1866 (1961).
59. E. Majorana, Nuovo Cimento **5**, 171 (1937).
60. А. Ю. Китаев, УФН **171**, прил. к **10**, 131 (2001).
61. S. V. Aksenov, J. Phys. Condens. Matter **34**, 255301 (2022).
62. Л. В. Келдыш, УФН **187**, 1273 (2017).

## Связь между магнитными и электрическими свойствами в серии наночастиц $\text{Co}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Fe}_2\text{O}_4$

Д. А. Петров<sup>+1)</sup>, И. С. Эдельман<sup>+\*</sup>, А. Тхакур<sup>×2)</sup>, П. Тхакур<sup>×2)</sup>, А. Л. Сухачев<sup>+</sup>, С. Г. Овчинников<sup>+\*</sup>

<sup>+</sup>Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения РАН – обособленное подразделение  
Федеральный исследовательский центр “Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук”,  
660036 Красноярск, Россия

<sup>\*</sup>Сибирский Федеральный Университет, 660041 Красноярск, Россия

<sup>×</sup>Amity University Haryana, Gurugram, 122413 Haryana, India

Поступила в редакцию 30 марта 2023 г.

После переработки 11 апреля 2023 г.

Принята к публикации 11 апреля 2023 г.

Представлены зависимости намагниченности от внешнего магнитного поля и температуры для наночастиц  $\text{Co}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Fe}_2\text{O}_4$  ( $x = 0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$ ), синтезированных методом цитратного прекурсора. Ферромагнитный порядок в наночастицах с  $x \geq 0.2$  возникал при температурах  $T$ , превышающих комнатную, а в наночастицах с  $x = 0$  и  $0.1$  при  $T$  около 100 К. Намагниченность насыщения,  $M_s$ , остаточная намагниченность,  $M_r$ , и коэрцитивная сила,  $H_c$ , увеличиваются с увеличением  $x$  и понижением температуры.  $M_s$  достигло очень высокого значения:  $M_s$  наночастиц с  $x = 0.5$  равно  $106.6 \text{ Гс} \cdot \text{см}^3/\text{г}$  при 100 К, а по литературным данным  $M_s$  стехиометрического объемного феррита Co равна  $90 \text{ Гс} \cdot \text{см}^3/\text{г}$  при 4.2 К. Выявлены и качественно объяснены корреляции между концентрационными зависимостями магнитных и электрических свойств.

DOI: 10.31857/S1234567823100087, EDN: cnfluf

Смешанные ферриты шпинели ( $\text{Co}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Fe}_2\text{O}_4$ ) привлекают большое внимание благодаря своим уникальным свойствам, таким как высокое удельное электрическое сопротивление и низкие потери на вихревые токи [1–5], высокая намагниченность насыщения и температура Кюри [6], термодинамическая стабильность, коррозионная стойкость, высокая механическая твердость, высокая адсорбционная способность. Наночастицы (НЧ) с различной относительной концентрацией Co и Zn имеют впечатляющий спектр применения: активные компоненты ферромагнитных (ФМ) жидкостей, постоянные магниты, компоненты компьютеров, системы адресной доставки лекарств, резонансная томография и многие другие (см., например, [7]). Предельные члены –  $\text{ZnFe}_2\text{O}_4$  и  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$  имеют одинаковую структуру кристаллической шпинели пространственной группы Fd-3m, но отличаются распределением катионов между кристаллическими позициями.  $\text{ZnFe}_2\text{O}_4$  – нормальная шпинель, в которой двухвалентные ионы  $\text{Zn}^{2+}$  занимают тетраэдрические позиции, а трехвалентные ионы  $\text{Fe}^{3+}$  – октаэдрические. В обращенной шпинели  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$  половина ионов  $\text{Fe}^{3+}$  занима-

ет тетраэдрические, а другая половина – октаэдрические позиции, тогда как ионы  $\text{Co}^{2+}$  предпочитают октаэдрические позиции. Согласно этим распределениям катионов,  $\text{ZnFe}_2\text{O}_4$  характеризуется антиферромагнитным порядком с низкой температурой Нееля,  $T_N = 10 \text{ К}$ , а  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$  является ферромагнетиком с высокой температурой Кюри,  $T_c = 793 \text{ К}$ , а намагниченность насыщения при комнатной температуре  $M_s = 66.3 \text{ Гс} \cdot \text{см}^3/\text{г}$  [7]. Однако в случае НЧ часто наблюдаются отклонения от этого идеального распределения из-за малого размера частиц, поверхностных эффектов и высокой концентрации поверхностных дефектов [8]. Степень инверсии можно представить формулами  $(\text{Zn}_{1-\delta}\text{Fe}_\delta) [\text{Zn}_\delta\text{Fe}_{2-\delta}] \text{O}_4$ , где круглые и квадратные скобки относятся к тетраэдрической (А) и октаэдрической (В) позициям, соответственно. Ряд авторов синтезировали частично инвертированные НЧ феррита цинка, ферромагнитные при комнатной температуре с намагниченностью насыщения, изменяющейся от 10 до  $88 \text{ Гс} \cdot \text{см}^3/\text{г}$  в зависимости от метода синтеза. Большое разнообразие распределений катионов по кристаллическим позициям и магнитных свойств наблюдалось несколькими авторами для случая смешанных шпинелей  $\text{Zn}_{1-x}\text{Co}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$  (например, [9–13]). Таким об-

<sup>1)</sup>e-mail: irbiz@iph.krasn.ru

<sup>2)</sup>A. Thakur, P. Thakur.

разом, технологические условия оказывали чрезвычайно сильное влияние на свойства синтезированных НЧ, что подчеркивает необходимость тщательного изучения магнитных характеристик полученных образцов в каждом конкретном случае.

Недавно серия НЧ  $\text{Co}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Fe}_2\text{O}_4$  с  $x$  в диапазоне от 0.0 до 0.5, приготовленная методом цитратного прекурсора, продемонстрировала выдающееся электрическое сопротивление и улучшенные диэлектрические свойства [14]. Величина тангенса угла диэлектрических потерь варьировалась в диапазоне 0.003–0.052 на частоте 1 МГц для различных концентраций Co, и образцы оказались очень хорошими изоляторами. Исследование магнитных свойств этой системы НЧ, предпринятое в настоящей работе, представляется важным с точки зрения взаимосвязи между электронной и магнитной подсистемами и приложениями НЧ.

Технология синтеза НЧ  $\text{Co}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Fe}_2\text{O}_4$  с ( $x = 0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$ ) (образцы 1–6 соответственно) подробно описана в [14]. Рентгеноструктурное исследование выявило кубическую структуру фазы шпинели пространственной группы Fd-3m. Средний размер кристаллитов образцов оказался в пределах  $28 \div 36$  нм. Постоянная решетки уменьшалась с 8.443 до 8.403 Å с увеличением концентрации кобальта, что было связано с меньшим радиусом иона  $\text{Co}^{2+}$  (0.72 Å) по сравнению с радиусом иона  $\text{Zn}^{2+}$  (0.74 Å). Зависимости намагниченности от внешнего магнитного поля и температуры изучались на вибрационном магнитометре Lake Shore 8604 в магнитном поле до 15 кЭ при температурах от 90 до 350 К.

Кривые намагничивания ( $M$ ) образцов 1–6 в зависимости от приложенного магнитного поля ( $H$ ) при 300 и 100 К представлены на рис. 1а и б, соответственно. Только образец 1 с  $x = 0$  демонстрирует чисто парамагнитное поведение при комнатной температуре. Даже для образца 2 с  $x = 0.1$  кривая намагничивания при комнатной температуре отклоняется от линейной зависимости от  $H$ , характерной для парамагнетика, а в случае образца 3 с  $x = 0.2$  хорошо видна очень узкая петля гистерезиса.

В то же время с увеличением магнитного поля намагниченность этих трех образцов линейно возрастает по полю, существенно отличаясь от хода кривых намагничивания образцов 4–6. Можно предположить, что часть НЧ в образцах 2 и 3 находится в суперпарамагнитном состоянии при комнатной температуре, тогда как большинство частиц в этих образцах являются парамагнитными. В случае образцов 4–6 форма кривых намагничивания указывает на суперпарамагнитное состояние основной части НЧ, а

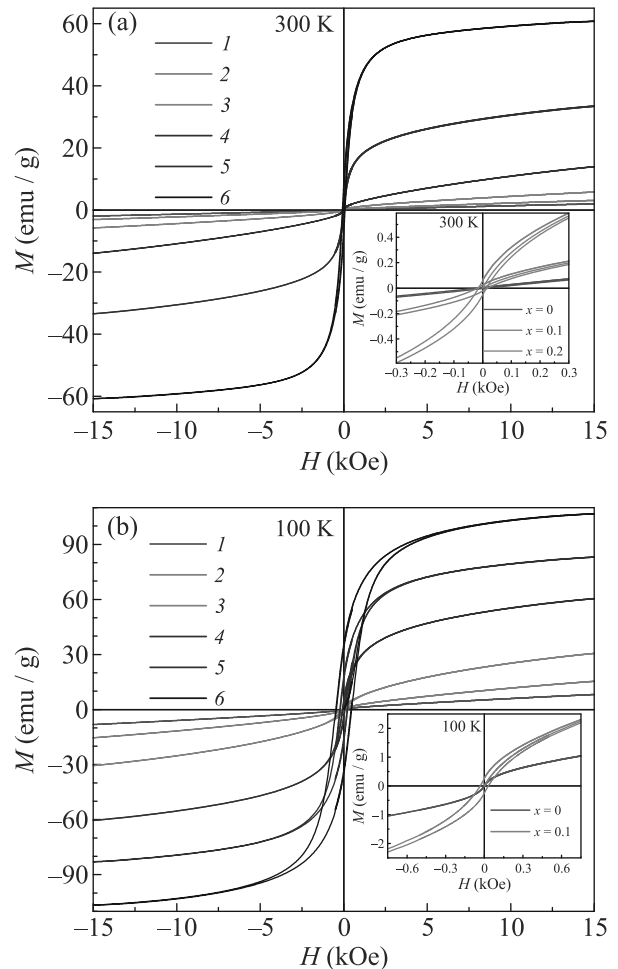


Рис. 1. (Цветной онлайн) Полевые зависимости намагниченности образцов 1–6, измеренные при  $T = 300$  (а) и 100 К (б). Вставки: (а) – кривые намагничивания образцов 1–3; (б) – для образцов 1 и 2

наличие гистерезиса может означать, что часть суперпарамагнитных НЧ заблокирована при комнатной температуре. При этом наблюдается резкий рост намагниченности при переходе от образца 3 к образцу 4, что можно интерпретировать как переход от гетерогенного магнитного состояния всего ансамбля НЧ, в котором сосуществуют парамагнитные и суперпарамагнитные НЧ, к суперпарамагнитному состоянию большинство НЧ. Аналогичная картина наблюдалась в [12, 13, 15, 16].

При понижении температуры до 100 К в образце 1, не содержащем Co, появляется суперпарамагнитная составляющая. Это следует из изменения формы кривой намагничивания: вблизи нуля появляется характерный  $s$ -образный изгиб. Появление магнитного момента в НЧ  $\text{ZnFe}_2\text{O}_4$  наблюдалось ранее (например, в [9]), но не всегда. Например, магнитное упорядочение не наблюдалось вплоть до 50 К

в НЧ Zn-шпинели, полученных методом соосаждения [2, 12]. Для всех остальных образцов при охлаждении наблюдается сильный рост намагниченности. Остаточная намагниченность  $M_r$  и коэрцитивная сила  $H_c$  также увеличиваются при охлаждении, но в разной степени.

Температурные зависимости намагниченности (рис. 2) образцов 1–5, снятые в магнитном поле 5 кЭ, или закону Ланжевена для магнитоупорядоченных сред, а также выравнивание магнитных моментов в направлении приложенного магнитного поля. Форма кривых температурной зависимости подтверждает сделанный при интерпретации кривых намагничивания вывод о концентрационном переходе НЧ из преимущественно парамагнитного в суперпарамагнитное состояние между концентрациями Co  $x = 0.2$  и  $x = 0.3$ .

Интересно отметить некоторые корреляции между концентрационными зависимостями магнитных и электрических свойств исследованных образцов. На рисунке 3 показаны концентрационные зависимости коэрцитивной силы и остаточной намагниченности в сравнении с концентрационными зависимостями электрического тока, протекающего через образец при напряжении 3 В, полученными из вольт-амперных характеристик. НЧ феррита Co-Zn прессовали в таблетки для проведения исследования электрических свойств.

Увеличение электрического тока с увеличением концентрации Co, показанное на рис. 3, означает уменьшение удельного сопротивления. В смеси  $ZnFe_2O_4$  и  $CoFe_2O_4$  уменьшение удельного сопротивления происходит из-за меньшего удельного сопротивления  $CoFe_2O_4$  по сравнению с  $ZnFe_2O_4$ . Чтобы понять, почему удельное сопротивление ферритов Co может быть меньше, мы можем рассмотреть расчеты электронной структуры в рамках теории функционала плотности (DFT). Такой расчет для  $CoFe_2O_4$  был сделан [17]. В данной работе приближение обобщенного градиента с потенциалом РВЕ и поправкой Хаббарда  $U$  использовалось для расчета электронной структуры для различного набора обменных параметров: конфигурация MS1 с ФМ Co-Co и Fe-Fe и АФМ Co-Fe обменами, MS2 со всеми ФМ обменами, MS3 с АФМ взаимодействиями Co-Co и ФМ Fe-Fe и MS4 с ФМ Co-Co и АФМ Fe-Fe. В то время как щель в плотности состояний (DOS) была получена для конфигураций MS1, MS2 и MS3, состояние MS4 является почти проводником с шириной запрещенной зоны, близкой к нулю.

В обсуждаемых в данной статье нанокристаллических образцах присутствует смесь катионов Fe, Co и Zn в разных подрешетках, которую можно рассматривать как смесь всех 4 возможных конфигураций. Если эта смесь является случайной, то 25 % проводящей фазы приведут к макроскопической проводимости всего образца в соответствии с идеями теории перколяции. В трехмерных решетках со случайной смесью изолирующей и проводящей фаз макроско-

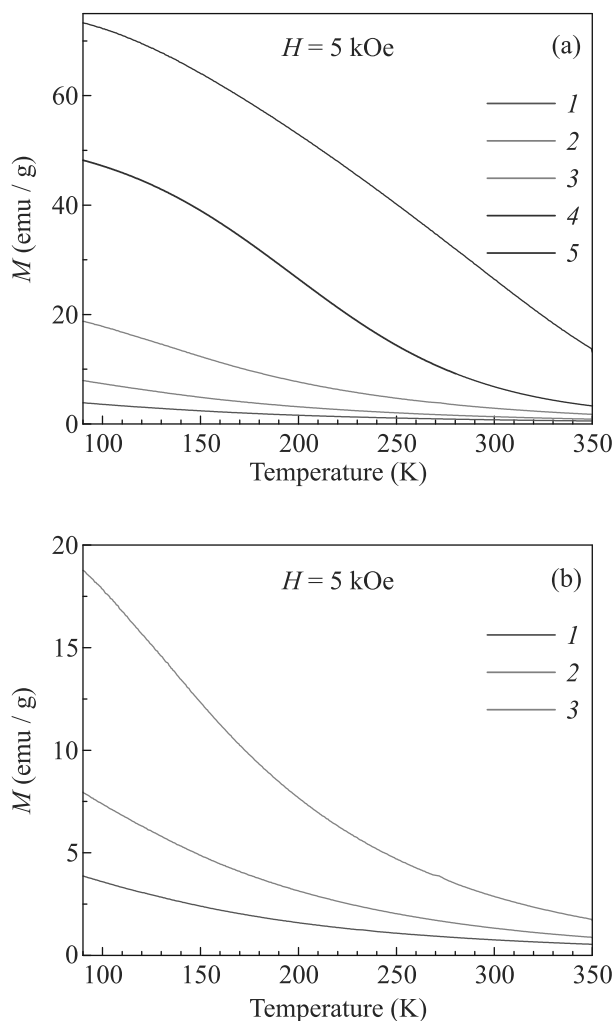


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Температурные зависимости намагниченности образцов 1–5 с  $x = 0–0.4$  соответственно в магнитном поле 5 кЭ; (б) – то же для образцов с  $x = 0–0.2$ , кривые 1–3

аналогичны FC-кривым для НЧ  $Co_xZn_{1-x}Fe_2O_4$ , синтезированных методом высокотемпературного синтеза, показанных в [12]. Несколько механизмов ответственны за увеличение намагниченности НЧ с понижением температуры. Среди них увеличение собственного магнитного момента каждой НЧ, подчиняющееся закону Кюри для парамагнетиков

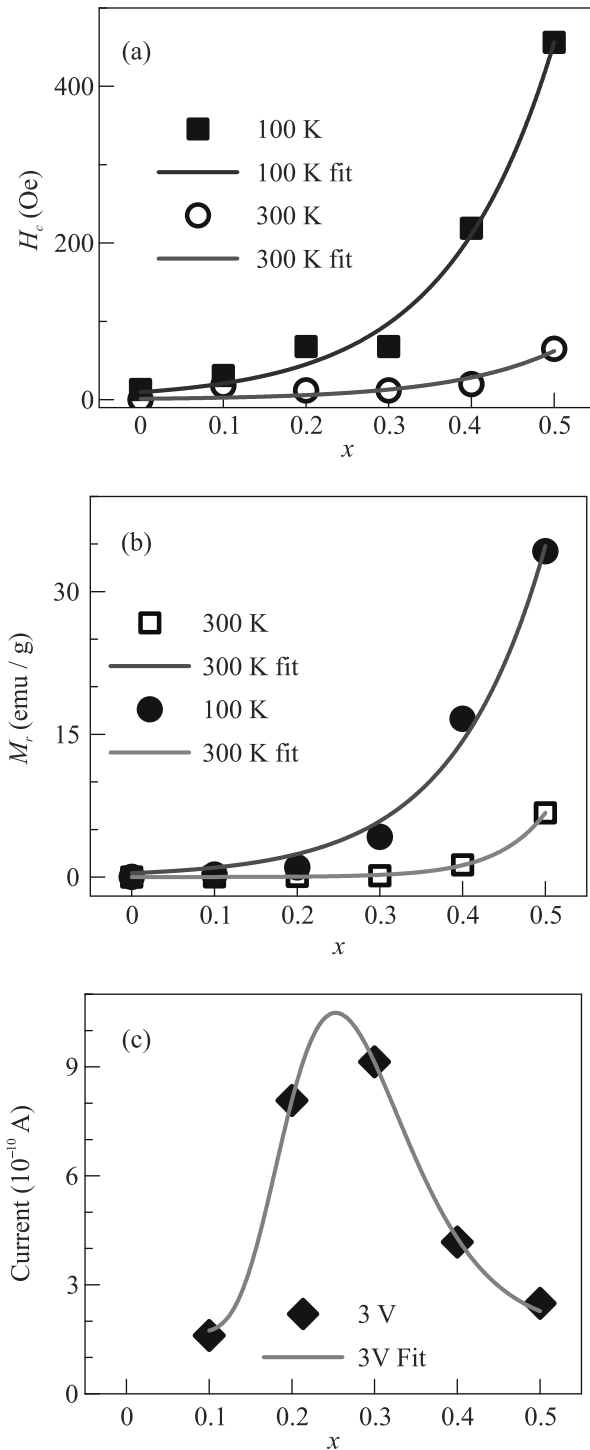


Рис. 3. (Цветной онлайн) Концентрационные зависимости  $H_c$ ,  $M_r$  и электрического тока при напряжении 3 В

пическая проводимость возникает выше порога перколяции  $x_c = 0.16$  [18].

Корреляция магнитных и электрических свойств на рис. 3, а также концентрационная зависимость сопротивления на постоянном токе от концентрации  $\text{Co}$

на рис. 12 статьи [14] могут быть объяснены в рамках теории перколяции. Минимальное сопротивление в  $\text{Co}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Fe}_2\text{O}_4$  на рис. 12 статьи [14] найдено при  $x = 0.2$  и  $0.3$ , чуть выше порога перколяции.

Авторы благодарят Центр коллективного пользования Красноярского научного центра СО РАН за помощь в проведении магнитных измерений.

Авторы А. Тхакур и П. Тхакур хотели бы отметить поддержку, оказанную в рамках гранта DST-FIST #SR/FST/PS-I/2018/48 Правительства Индии. Авторы также выражают признательность Gurujal, инициативе районной администрации Gurugram за финансовую помощь, см. проект #176 Gurujal от 10 сентября 2019 г., грант Amity Incubation от Министерства электроники и информационных технологий: (Meity) программу в рамках Технологического инкубирования и развития предпринимателей (TIDE 2.0) и стартап Nanolattice X.

1. M. A. Mousa, A.M Summan, M. A. Ahmed, and A. M. Badawy, *J. Mater. Sci.* **24**, 2478 (1989).
2. T. Slatineanu, A.R. Iordan, V. Oancea, M.N. Palamaru, I. Dumitru, C.P. Constantin, and O.F. Caltun, *J. Mater. Sci. Eng. B* **178**, 1040 (2013).
3. A.S. Kamzin, I.M. Obaidat, V.G. Semenov, V. Narayanaswamy, I.A. Al-Omari, B. Issa, and I. V. Buryanenko, *Phys. Solid State* **6**, 714 (2022).
4. A.S. Kamzin, I.M. Obaidat, V.G. Semenov, V. Narayanaswamy, I.A. Al-Omari, B. Issa, and I. V. Buryanenko, *Phys. Solid State* **65**(3), 482 (2022).
5. Yu.S. Gaiduk, E.V. Korobko, K.A. Shevtsova, D.A. Kotikov, I.A. Svito, A.E. Usenko, D.V. Ivashenko, A. Fahmy, and V.V. Pankov, *Phys. Solid State* **22**(1), 28 (2022).
6. J. Smit and H.P. Wijn, *Ferrites. Physical properties of ferrimagnetic oxides in relation to their technical applications*, Philips' Techn. Libr., Eindhoven (1959).
7. R. Sagayaraj, S. Aravazhi, and G. Chandrasekaran, *Int. Nano Lett.* **11**, 307 (2021).
8. C. Yao, Q. Zeng, G.F. Goya, T. Torres, J. Liu, H. Wu, M. Ge, Y. Zeng, Y. Wang, and J.Z. Jiang, *J. Phys. Chem. C* **111**, 12274 (2007).
9. R. Ramadan, M. K. Ahmed, and V. Uskokovic, *J. Alloys Compd.* **856**, 157013 (2021).
10. F. Gozuak, Y. Koseoglu, A. Baykal, and H. Kavasa, *J. Magn. Magn. Mater.* **321**, 2170 (2009).
11. S.G.C. Fonseca, L.S. Neiva, M.A.R. Bonifácio, P.R.C. dos Santos, U.C. Silva, and J.B.L. de Oliveira, *Mater. Res.* **21**, 20170861 (2018).
12. P. A. Asogekar, S.K. Gaonkar, A. Kumar, and V.M.S. Verenkar, *Mater. Res. Bull.* **141**, 111330 (2021).

13. T. Tatarchuk, M. Bououdina, W. Masyk, O. Shyichuk, N. Paliychuk, I. Yaremiy, B. Al-Najar, and M. Pacia, *Nanoscale Res. Lett.* **12**, 141 (2017).
14. D. Chahar, S. Taneja, P. Thakur, and A. Thakur, *J. Alloys Comp.* **843**, 155681 (2020).
15. G. Fan, J. Tong, and F. Li, *Ind. Eng. Chem. Res.* **51**, 13639 (2012).
16. W.S. Mohamed, M. Alzaid, M.S.M. Abdelbaky, Z. Amghouz, S. García-Granda, and A.M. Abu-Dief, *Nanomaterials* **9**, 1602 (2019).
17. I.P. Duru, *Physica B: Physics of Cond. Matter.* **627**, 413548 (2022).
18. J.M. Ziman, *Models of Disorder*, Cambridge Univ. Press, N.Y. (1979).

# Влияние магнитной доменной структуры на поляризационные эффекты в мессбауэровских спектрах монокристаллов бората железа $\text{FeVO}_3$

Н. И. Снегирёв<sup>+1)</sup>, М. А. Чуев\*, И. С. Любутин<sup>+</sup>, С. С. Старчиков<sup>+</sup>, С. В. Ягупов<sup>×</sup>, М. Б. Стругацкий<sup>×</sup>

<sup>+</sup>Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова Федеральный научно-исследовательский центр  
“Кристаллография и фотоника” РАН, 119333 Москва, Россия

\*Физико-технологический институт им. К. А. Валиева РАН, 117218 Москва, Россия

<sup>×</sup>Физико-технический институт ФГАОУ ВО “КФУ им. В. И. Вернадского”, 295007 Симферополь, Россия

Поступила в редакцию 21 марта 2023 г.

После переработки 12 апреля 2023 г.

Принята к публикации 13 апреля 2023 г.

Исследованы мессбауэровские спектры монокристаллов бората железа  $\text{FeVO}_3$  при температурах выше и ниже точки магнитного перехода при различной ориентации кристаллов относительно направления распространения  $\gamma$ -квантов. Для описания мессбауэровских спектров разработана теоретическая модель, которая учитывает различные ориентации магнитных моментов в плоскости кристалла. Установлено, что наличие в борате железа магнитной доменной структуры существенно влияет на форму мессбауэровских спектров и интенсивности резонансных переходов. Предложенная модель может быть полезна для определения конфигурации магнитной доменной структуры материалов по данным мессбауэровский спектроскопии.

DOI: 10.31857/S1234567823100099, EDN: cnlfgt

**1. Введение.** Кристаллы бората железа являются классическим модельным объектом для исследований в области магнетизма и на них изучен ряд уникальных явлений и эффектов [1–5]. Высококачественные образцы  $\text{FeVO}_3$ , а также наноккомпозиты на их основе, находят свое применение в современных отраслях науки и техники [6, 7].

Кристаллическая структура бората железа описывается пространственной группой симметрии  $R\bar{3}c$  [8]. Образцы  $\text{FeVO}_3$  могут быть синтезированы из растворов в высокотемпературных расплавах. В этом случае они кристаллизуются в виде тонких базисных пластин, перпендикулярных инверсионной оси третьего порядка [9]. Магнитные моменты атомов железа расположены в слоях, параллельных базису кристалла, и упорядочены антиферромагнитно. Однако, ввиду антисимметричного суперобменного взаимодействия (эффект Дзялошинского–Мории), магнитные подрешетки слегка скошены, что создает слабый результирующий магнитный момент [10]. Вектор антиферромагнетизма и слабый ферромагнитный момент лежат в базисной плоскости кристалла. Наличие слабого момента обуславливает

процессы перемагничивания в этих кристаллах. Точка Нееля составляет  $T_N = 348.3 \text{ K}$  [7].

В ядерно-резонансных исследованиях при анализе сверхтонкой структуры спектров бората железа необходимо рассматривать комбинированное магнитное дипольное и электрическое квадрупольное сверхтонкое взаимодействие [7]. Тензор градиента электрического поля (ГЭП) в  $\text{FeVO}_3$  является аксиально-симметричным, его главная ось ортогональна магнитным моментам атомов железа и результирующему слабому ферромагнитному моменту [11]. Это приводит к характерной асимметрии интенсивностей линий в мессбауэровских спектрах бората железа [7].

Относительные интенсивности линий в мессбауэровских спектрах поликристаллических образцов определяются лишь вероятностями соответствующих им резонансных переходов [12, 13].

В случае монокристаллов, интенсивности линий зависят также от направления эффективного магнитного поля на ядрах железа (которое совпадает с направлением магнитного момента атома железа) и главной оси ГЭП относительно направления волнового вектора  $\gamma$ -кванта  $\mathbf{k}_\gamma$ , испущенного источником излучения. В этом заключаются поляризацион-

<sup>1)</sup>e-mail: niksnegir@yandex.ru

ные эффекты в мессбауэровских спектрах. Наблюдение и трактовка этих эффектов впервые выполнены в пионерских работах Ханни и соавторов [14, 15], и затем развиты Гонзером [16].

При чисто магнитном сверхтонком взаимодействии, основной уровень ядер  $^{57}\text{Fe}$  в магнитное поле расщепляется на два подуровня, а возбужденный уровень на четыре подуровня. С учетом правил отбора, из восьми переходов возможными оказываются только шесть [14, 15]. Именно излучение, соответствующее энергии этих переходов, становится поляризованным [16].

Отметим, что зависимость интенсивностей резонансных линий от ориентации образца можно наблюдать также и на поликристаллах, если вероятность эффекта Мессбауэра анизотропна (эффект Гольданского–Карягина) [17].

Соотношение интенсивностей линий в мессбауэровских спектрах ферромагнетиков, намагниченных внешним магнитным полем, а также полидоменных ферромагнетиков, не обладающих спонтанной намагниченностью, описывается известными из литературы выражениями [18]. Однако, в случае наличия сравнительно крупных магнитных доменов, когда их конфигурация не определяется статистическим разбросом ориентаций намагниченностей, такой подход оказывается неприменим.

Целью настоящей работы являются экспериментальные и теоретические исследования влияния магнитной доменной структуры на поляризационные эффекты в мессбауэровских спектрах монокристаллов бора железа  $\text{FeVO}_3$ .

**2. Экспериментальная часть.** Исследованный монокристалл  $\text{FeVO}_3$  высокого структурного совершенства был синтезирован методом из раствора в высокотемпературном расплаве, и имел характерные размеры около  $8 \times 4 \text{ мм}^2$  в базисной плоскости, и около  $0.15 \text{ мм}$  в толщину [9, 19].

Мессбауэровские спектры получены с помощью спектрометра MS-1104Em с использованием радиоактивного источника  $\text{Co}^{57}(\text{Rh})$ . Измерения при высокой температуре проводились с использованием “мессбауэровской” резистивной печи MRF – 750 К. Точность поддержания температуры была не хуже  $\pm 1 \text{ К}$ . Источник  $\gamma$ -излучения находился при комнатной температуре. В качестве эталонного образца для калибровки изомерных сдвигов использовался стандартный поглотитель из тонкой фольги  $\alpha\text{-Fe}$ .

Для обеспечения необходимой ориентации кристалла относительно направления волнового вектора  $\gamma$ -квантов  $\mathbf{k}_\gamma$  изготовлена специализированная ячейка, которая имела отклоняемую подвижную панель с

возможностью регулирования угла наклона (с точностью около  $\pm 1^\circ$ ). Образец крепился на отклоняемой подвижной панели, и держатель располагался на оптической оси спектрометра, либо вводился в шахту печи. Кристалл  $\text{FeVO}_3$  был ориентирован таким образом, что нормаль ( $x$ ) к базисной плоскости (001) составляла угол  $\theta_\gamma$  с направлением волнового вектора  $\gamma$ -квантов  $\mathbf{k}_\gamma$  (см. рис. 1).

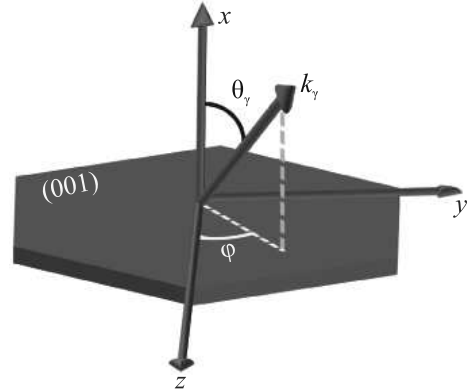


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схематическая ориентация базисной плоскости (001) монокристалла  $\text{FeVO}_3$  и волнового вектора  $\gamma$ -кванта  $\mathbf{k}_\gamma$ . Здесь  $z$  – ось квантования (направление вектора магнитного момента),  $\phi$  – угол между проекцией вектора  $\mathbf{k}_\gamma$  на плоскость ( $y, z$ ) и осью квантования,  $\theta_\gamma$  – угол между вектором  $\mathbf{k}_\gamma$  и осью  $x$

Экспериментальные мессбауэровские спектры были скорректированы с учетом эффективной толщины поглотителя по методике, развитой в работе [7].

**3. Результаты и их обсуждение.** На рисунке 2 слева показаны мессбауэровские спектры монокристалла  $\text{FeVO}_3$  для разных значений угла  $\theta_\gamma$ , полученные при комнатной температуре, т.е. существенно ниже точки магнитного фазового перехода. Видно, что с увеличением угла  $\theta_\gamma$  интенсивности  $I_i$  первой и шестой линий спектра (связанных с резонансными переходами между ядерными подуровнями  $^{57}\text{Fe}$  с проекциями спина ядра  $-3/2 \rightarrow 1/2$  и  $+3/2 \rightarrow +1/2$ ) увеличиваются, а интенсивности второй и пятой линий (связанных с переходами  $-1/2 \rightarrow -1/2$  и  $+1/2 \rightarrow +1/2$ ) уменьшаются. Соотношение  $I_{2,5}/I_{1,6}$  составляет 1.333(1), 1.102(2), 0.875(3) и 0.739(3) для углов  $\theta_\gamma = 0, 20, 35$  и  $45^\circ$ , соответственно.

Известно, что спектр поглощения  $\gamma$ -кванта с энергией  $E = \hbar\omega$  определяется следующим выражением [20]:

$$\sigma(\omega) = -\frac{\sigma_a \Gamma_0}{2} \text{Im} \sum_{\zeta} \sum_{\substack{m_g m_e \\ j, m_j}} V_{m_g \tilde{m}_j}^{(\zeta)+} \times \frac{\langle m_e | \tilde{m}_j \rangle}{\tilde{\omega} - \tilde{\lambda}_j + \omega_g m_g + i\Gamma_0/2} V_{m_e m_g}^{(\zeta)}, \quad (1)$$



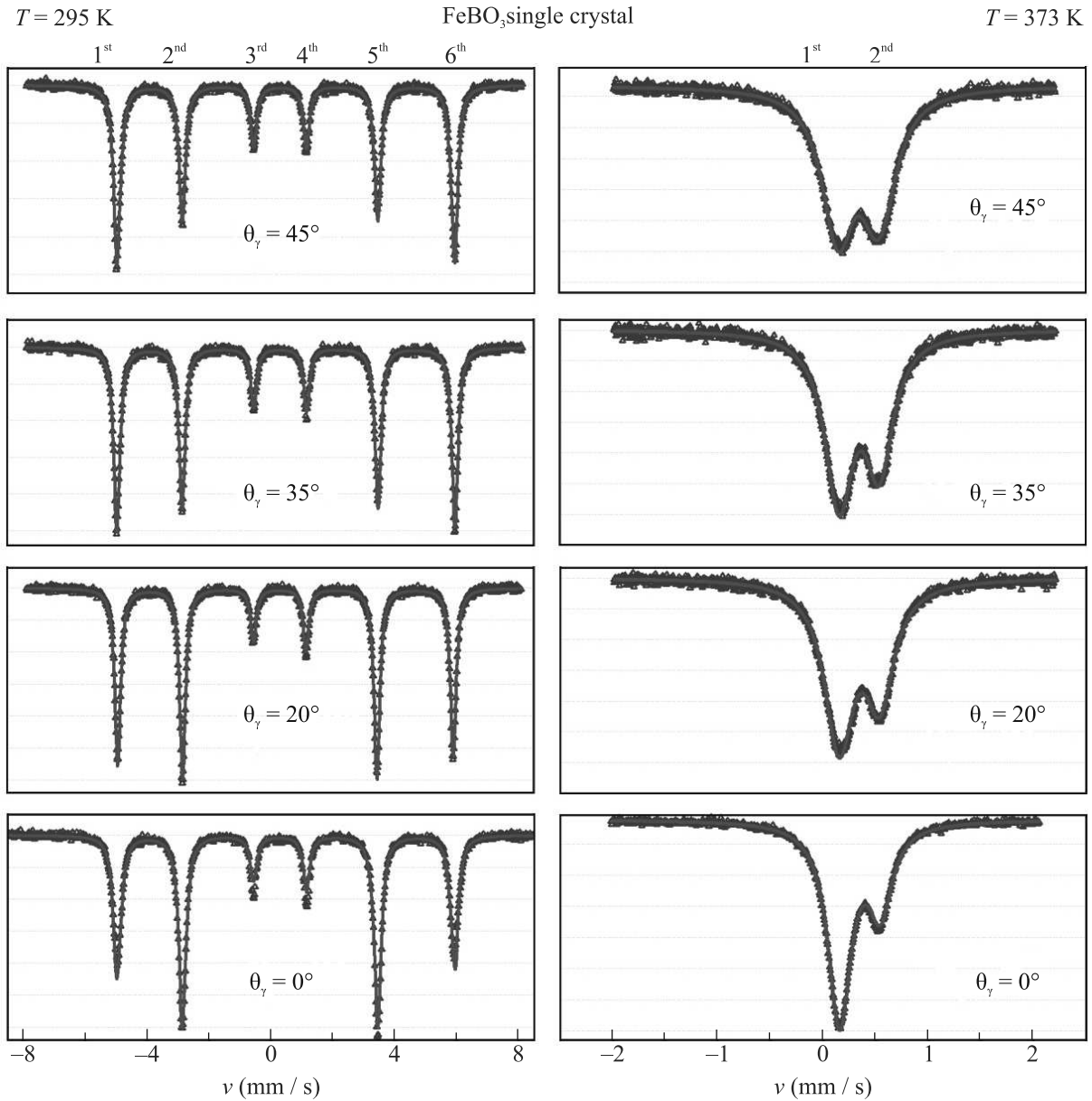


Рис. 2. (Цветной онлайн) Мессбауэровские спектры монокристалла  $\text{FeBO}_3$ , ориентированного базисной плоскостью (001) под различными углами к волновому вектору  $\gamma$ -квантов  $\mathbf{k}_\gamma$  (см. рис. 1). Спектры получены при температуре 295 К ( $T < T_N$ , слева) и 373 К ( $T < T_N$ , справа). Синие точки – экспериментальные данные, красная огибающая линия – результат модельной обработки спектра. Сверху указаны порядковые номера резонансных линий

где  $\sigma_a$  – эффективное сечение поглощения,  $\Gamma_0$  – естественная ширина линии,  $\tilde{\omega} = \omega - E_0/\hbar$ ,  $E_0$  – энергия резонансного перехода,  $\tilde{\lambda}_j$  – собственные значения гамильтониана,  $\tilde{m}_j$  – проекции ядерного спина на ось квантования, для которой гамильтониан системы в возбужденном состоянии ядра диагонален и представлен в виде:

$$\hat{H}^{(e)} = -\omega_e I_z^{(e)} + q \left[ \hat{I}_z^2 - \frac{1}{3} I(I+1) + \frac{\eta}{3} (\hat{I}_x^2 - \hat{I}_y^2) \right]. \quad (2)$$

Здесь  $q$  – константа квадрупольного взаимодействия,  $\eta$  – параметр асимметрии,  $\omega_{g,e}$  – ларморовские частоты прецессии ядерных спинов,  $m_g$  и  $m_e$  – проекции ядерного спина для основного и возбужденного состояний, соответственно,  $I$  – ядерный спин,  $\hat{I}_z$ ,  $\hat{I}_x$ ,  $\hat{I}_y$  – операторы проекций ядерного спина в возбужденном состоянии на направление главных осей тензора ГЭП.  $V_{m_e m_g}^{(\zeta)}$  – матричные элементы оператора взаимодействия гамма-кванта с поляризацией  $\zeta$  и ядра, которые определяются коэффициентами

Клебша–Джордана и функцией углового распределения интенсивности излучения для заданного направления (угла  $\theta_k$ ) волнового вектора гамма-кванта  $\mathbf{k}_\gamma$  относительно оси квантования  $z$  [21].

В нашей предыдущей работе [7] был рассмотрен случай, когда вектор  $\mathbf{k}_\gamma$  направлен вдоль нормали к поверхности кристалла, так что усреднение в спектрах, измеренных при низких температурах, по хаотической поляризации  $\gamma$ -квантов сводилось к сумме по двум проекциям оператора ядерного тока  $\hat{J}_z$  и  $\hat{J}_y$  с равными весами (см. [21]). При этом в мессбауэровском спектре соотношение интенсивностей пар крайних линий  $I_{2.5}/I_{1.6}$  магнитной сверхтонкой структуры (без учета эффектов слабой асимметрии пар линий за счет перемешивания квантовых состояний) выражалось простой формулой [7]

$$\frac{I_{2.5}^{(90)}}{I_{1.6}^{(90)}} \approx \frac{4}{3}. \quad (3)$$

Здесь через  $I^{(90)}$  обозначены интенсивности линий для случая, когда  $\phi = 90^\circ$  (см. рис. 1).

Однако, когда вектор  $\mathbf{k}_\gamma$  отклоняется от нормали, описанный выше случай усложняется, поскольку необходимо учитывать ориентацию плоскости поворота вектора  $\mathbf{k}_\gamma$  относительно оси квантования  $z$  или относительно направления магнитного момента атома железа (см. рис. 1).

В синхротронных источниках излучение обычно является поляризованным. В лабораторных мессбауэровских установках излучение от радиоактивного источника не поляризовано, поэтому необходимо выполнить усреднение оператора взаимодействия  $\gamma$ -кванта с ядром по хаотически распределенным векторам поляризации  $\zeta$  в плоскости, перпендикулярной вектору  $\mathbf{k}_\gamma$ . Такое усреднение наиболее удобно проводить по процедуре, предложенной в работе [21] для супероператора  $\hat{\mathbf{D}}$  с матричными элементами

$$\mathbf{D}_{m'_e m'_g m_e m_g} = \sum_{\zeta} (\zeta \hat{\mathbf{j}}^+) m_e m_g (\zeta^* \hat{\mathbf{j}}) m'_g m'_e. \quad (4)$$

В результате преобразований получаем

$$\langle \hat{\mathbf{D}} \rangle = \frac{1}{2} \left( \hat{J}_z^+ \hat{J}_z (\cos^2 \theta_\gamma \cos^2 \phi + \sin^2 \phi) + \hat{J}_x^+ \hat{J}_x \sin^2 \theta_\gamma + \hat{J}_y^+ \hat{J}_y (\cos^2 \theta_\gamma \sin^2 \phi + \cos^2 \phi) \right). \quad (5)$$

Этот супероператор и будет определять соотношение интенсивностей линий мессбауэровского спектра в нашей экспериментальной схеме.

Рассмотрим несколько предельных ориентаций магнитных моментов атомов железа в плоскости исследуемого кристалла. Если кристалл имеет единственное направление магнитных моментов, то для

$\phi = 0$  поворот вектора  $\mathbf{k}_\gamma$  происходит в плоскости  $(xz)$ , тогда

$$\langle \hat{\mathbf{D}} \rangle = \frac{1}{2} \left( \hat{J}_z^+ \hat{J}_z \cos^2 \theta_\gamma + \hat{J}_x^+ \hat{J}_x \sin^2 \theta_\gamma + \hat{J}_y^+ \hat{J}_y \right), \quad (6)$$

и соотношение интенсивностей пар крайних линий в спектре принимает вид

$$\frac{I_{2.5}^{(0)}}{I_{1.6}^{(0)}} = \frac{4 \cos^2 \theta_\gamma}{3 (1 + \sin^2 \theta_\gamma)}. \quad (7)$$

Здесь через  $I^{(0)}$  обозначены интенсивности для случая, когда  $\phi = 0^\circ$ . Для  $\phi = 90^\circ$  соотношение интенсивностей пар крайних линий будет определяться выражением (3).

При произвольных значениях  $\phi$  соотношение интенсивностей пар крайних линий спектра будет находиться в интервале между его значениями в (3) и (7). Для случая хаотически ориентированных магнитных доменов в плоскости кристалла, т.е. хаотического распределения векторов магнитных моментов атомов железа в этой плоскости получаем:

$$\langle \hat{\mathbf{D}} \rangle = \frac{1}{4} \times \quad (8)$$

$$\times \left( \left( \hat{J}_z^+ \hat{J}_z + \hat{J}_y^+ \hat{J}_y \right) (1 + \cos^2 \theta_\gamma) + \hat{J}_x^+ \hat{J}_x \sin^2 \theta_\gamma \right),$$

что дает

$$\frac{\bar{I}_{2.5}}{\bar{I}_{1.6}} = \frac{2 (1 + \cos^2 \theta_\gamma)}{3}. \quad (9)$$

Здесь через  $\bar{I}$  обозначены усредненные значения интенсивности для случая хаотической ориентации магнитных доменов.

В кристаллах  $\text{FeVO}_3$  существует слоистая магнитная доменная структура. Доменные слои параллельны базисной плоскости кристалла и разделены блоховскими доменными границами. Внутри каждого слоя домены разделяются неелевскими границами, ортогональными базисной плоскости [22, 23].

Группа симметрии кристалла  $\text{FeVO}_3$  содержит инверсионную ось третьего порядка, которая ортогональна базисной плоскости (т.е. направлена вдоль оси  $x$  на рис. 1). Это означает существование шести ориентаций для направлений намагниченности в доменах. Направление намагниченности определяется слабым ферромагнитным моментом, который образован за счет скоса двух антиферромагнитных подрешеток железа. В пренебрежении скосом магнитных подрешеток (55 угл. мин) выражение (5) нужно усреднить по шести ориентациям вектора  $\mathbf{k}_\gamma$  относительно оси квантования  $z$  с углами  $\phi_n = \phi_0 + n60^\circ$  ( $n = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ ). Такая модель позволяет учесть

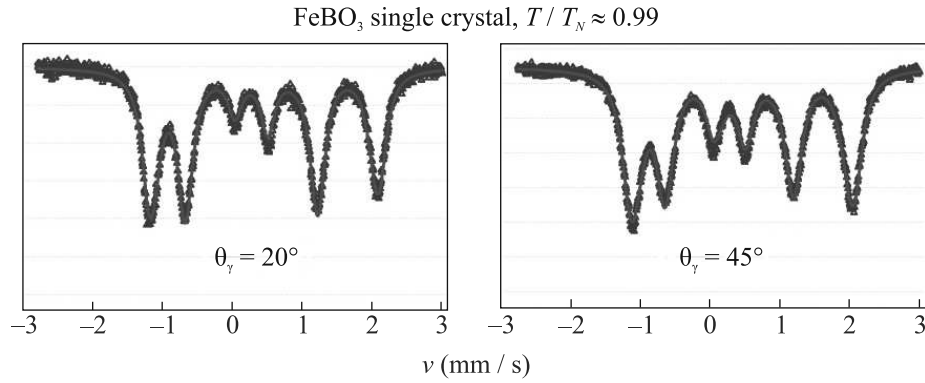


Рис. 3. (Цветной онлайн) Мессбауэровские спектры монокристалла FeBO<sub>3</sub>, ориентированного базисной плоскостью (001) под различными углами к волновому вектору  $\gamma$ -квантов  $\mathbf{k}_\gamma$  (см. рис. 1). Спектры получены при температуре вблизи магнитного фазового перехода ( $T \sim T_N$ ). Синие точки – экспериментальные данные, красная огибающая линия – результат модельной обработки спектра

все комбинации, когда взаимные ориентации намагниченностей в доменах образуют углы 60, 120 и 180°. В результате получаем

$$\langle \hat{\mathbf{D}} \rangle = \frac{1}{4} \times \quad (10)$$

$$\times \left( \left( \hat{J}_z^+ \hat{J}_z + \hat{J}_y^+ \hat{J}_y \right) (1 + \cos^2 \theta_\gamma) + 2 \hat{J}_x^+ \hat{J}_x \sin^2 \theta_\gamma \right),$$

для произвольных  $\phi_0$  и

$$\frac{I_{2.5}^{(n60)}}{I_{1.6}^{(n60)}} = 4 \frac{1 + \cos^2 \theta_\gamma}{3(3 - \cos^2 \theta_\gamma)}. \quad (11)$$

Здесь через  $I^{(n60)}$  обозначены интенсивности резонансных линий для случая, когда конфигурация направлений магнитных моментов в базисной плоскости кристалла определяется как  $\phi_n = \phi_0 + n60^\circ$ .

Эти выражения были использованы нами для описания мессбауэровских спектров монокристаллов FeBO<sub>3</sub>. Как можно видеть из рис. 2, 3, экспериментальные данные находятся в хорошем согласии с результатами модельной обработки.

Мессбауэровские спектры FeBO<sub>3</sub>, полученные выше температуры магнитного упорядочения ( $T > T_N$ ) показаны на рис. 2, справа. Интенсивность линий зависят от ориентации оси ГЭП относительно вектора  $\mathbf{k}_\gamma$  и от величины параметра асимметрии  $\eta$ . При аксиально симметричном ГЭП ( $\eta = 0$ ) относительная интенсивность линий  $I$  в дублете как функция угла  $\theta_\gamma$  между главной осью ГЭП (которая, направлена вдоль оси третьего порядка, т.е.  $x$  на рис. 1) и вектором  $\mathbf{k}_\gamma$  дается выражением [13]:

$$\frac{I_1}{I_2} = \frac{1 + \cos^2 \theta_\gamma}{\frac{2}{3} + \sin^2 \theta_\gamma}. \quad (12)$$

В соответствии с этим выражение, интенсивность резонансных переходов  $\pm 3/2 \rightarrow \pm 1/2$  убывает с увеличением угла  $\theta_\gamma$ , а интенсивность переходов  $\pm 1/2 \rightarrow \pm 1/2$  растёт. В мессбауэровских спектрах это выражается в постепенном “выравнивании” интенсивностей линий дублета при повороте кристаллической пластины относительно вектора  $\mathbf{k}_\gamma$  (см. рис. 2, справа).

На рисунке 3 показаны спектры монокристалла FeBO<sub>3</sub>, полученные вблизи температуры магнитного фазового перехода. В этой области наличие комбинационного магнитного дипольного и электрического квадрупольного сверхтонкого взаимодействия, а также температурных флуктуаций, существенно модифицирует форму спектра и асимметрию интенсивностей пар линий [7]. Как и в случае магнитного секстета, с увеличением угла  $\theta_\gamma$  возрастают интенсивности крайних линий и уменьшается асимметрия центральных линий спектра.

Смоделированные в соответствии с выражениями (1) и (10) мессбауэровские спектры монокристалла FeBO<sub>3</sub> представлены на рис. 4а. Для детальной визуализации показан диапазон скоростей, ограниченный  $[-6; -2]$  мм/с, где расположены 1-я и 2-я линии спектра. Видно, что в отличие от стандартного случая ферромагнетика (когда имеется единственное направление магнитных моментов), в борате железа интенсивности 2-й (и, аналогично, 5-й) линии спектра не обращаются в ноль при  $\theta = 90^\circ$  [17]. Это является следствием существования в FeBO<sub>3</sub> магнитной доменной структуры и, соответственно, наличия нескольких направлений магнитных моментов. Данный факт необходимо принимать во внимание при исследованиях, например, процессов спиновых переориентаций в слабоферромагнитных кристаллах.

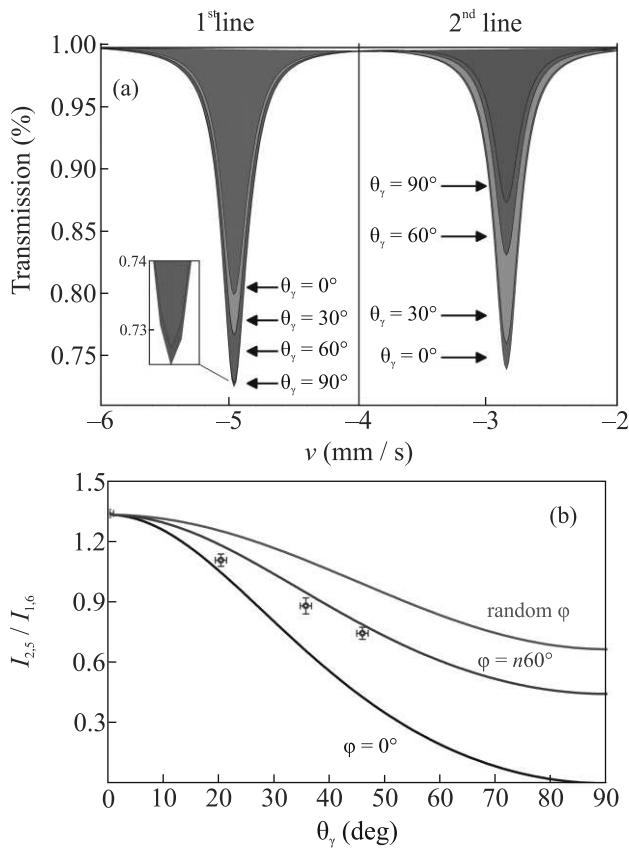


Рис. 4. (Цветной онлайн) (а) – Смоделированные мессбауэровские спектры монокристалла  $\text{FeVO}_3$  при  $T = 295$  К для случая ориентации базисной плоскости кристалла (001) под различными углами к волновому вектору  $\gamma$ -квантов  $\mathbf{k}_\gamma$  (см. рис. 1). (б) – Угловая зависимость отношения интенсивностей линий  $I_{2.5}/I_{1.6}$  мессбауэровского спектра, рассчитанная для случаев единственного направления магнитных моментов в плоскости кристалла (черная линия) и хаотически ориентированных магнитных доменов (красная линия). Синяя линия представлена для случая, когда магнитные моменты в доменах ориентированы вдоль кристаллографических осей тригональной решетки в соответствии с выражением  $\phi_n = \phi_0 + n60^\circ$ . Синими точками показаны экспериментальные значения  $I_{2.5}/I_{1.6}$ , полученные в результате модельной обработки мессбауэровских спектров, представленных на рис. 2

Экспериментально определенная угловая зависимость отношения интенсивностей резонансных линий (синие точки, рис. 4б) хорошо согласуется с рассчитанной для случая, когда взаимные ориентации намагниченностей в доменах образуют углы  $60^\circ$ ,  $120^\circ$  и  $180^\circ$  (т.е. конфигурации  $\phi_n = \phi_0 + n60^\circ$ ) (синяя линия, рис. 4б). Небольшое отличие экспериментальных и теоретически рассчитанных значений может быть связано с тем, что для простоты модели мы пренебрегли существованием слоистой (вдоль оси тре-

тьего порядка) доменной структуры [23]. Кроме того, такое различие может быть обусловлено механизмами, связанными с магнитоупругим взаимодействием, которое в борате железа проявляется чрезвычайно сильно, из-за особенностей его кристаллической и магнитной структуры [24].

Таким образом, сравнение экспериментальной и теоретической угловых зависимостей соотношения интенсивностей линий в мессбауэровских спектрах позволяет оценить конфигурацию магнитных доменов в исследуемом кристалле.

**Выводы.** В данном исследовании, на примере монокристаллов бората железа, показано, как магнитная доменная структура может влиять на поляризационные эффекты в мессбауэровских спектрах. Это происходит за счет различной ориентации вектора излучения  $\mathbf{k}_\gamma$  относительно направления намагниченности в доменах.

Разработана теоретическая модель для описания мессбауэровских спектров монокристаллов бората железа с учетом наличия в них магнитной доменной структуры. Рассмотрены предельные случаи конфигурации магнитных доменов. Получены экспериментальная и теоретическая угловые зависимости отношения интенсивностей линий мессбауэровского спектра. Установлено, что наилучшее описание экспериментальных данных достигается в рамках модели, когда взаимные ориентации намагниченностей в доменах образуют углы  $60^\circ$ ,  $120^\circ$  и  $180^\circ$ .

Описанный в работе подход позволяет оценить конфигурацию магнитных доменов в исследуемом кристалле по данным мессбауэровской спектроскопии. Полученные результаты могут быть полезны для применения кристаллов  $\text{FeVO}_3$  в новых высокотехнологичных отраслях.

Исследования выполнены при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект # 19-29-12016\21-мк, в части подготовки кристаллических образцов, мессбауэровских исследований и теоретического анализа.

Разработка, изготовление и апробация специализированной экспериментальной ячейки, а также оптическая обработка экспериментальных образцов проведены при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН.

Математические расчеты проведены в рамках Государственного задания ФТИАН им. К. А. Валиева РАН Минобрнауки РФ по теме FFNN-2022-0019.

Авторы благодарят сотрудников опытно-экспериментального отдела ФНИЦ «Кристалло-

графия и фотоника” РАН и лично Ю. М. Дымшица, за значительную помощь в проведении работы.

1. R. Diehl, W. Jantz, B.I. Nolaeng, and W. Wettling, *Curr. Top. Mater. Sci.* **11**, 242 (1984).
2. N.I. Snegirev, I.S. Lyubutin, S.V. Yagupov, M.A. Chuev, N.K. Chumakov, O.M. Zhigalina, D.N. Khmelenin, and M.B. Strugatsky, *Russ. J. Inorg. Chem.* **66**, 1217 (2021).
3. V.E. Zubov, A.D. Kudakov, D.A. Bulatov, M.B. Strugatskii, and S.V. Yagupov, *JETP Lett.* **116**, 394 (2022).
4. V.E. Zubov, A.D. Kudakov, N.L. Levshin, I.A. Belov, and M.B. Strugatskii, *JETP Lett.* **105**, 706 (2017).
5. N.I. Snegirev, I.S. Lyubutin, S.V. Yagupov, A.G. Kulikov, V.V. Artemov, Y.A. Mogilenec, and M.B. Strugatsky, *JETP Lett.* **112**, 352 (2020).
6. N.I. Snegirev, I.S. Lyubutin, A.G. Kulikov, S.V. Yagupov, K.A. Seleznyova, Y.A. Mogilenec, and M.B. Strugatsky, *Crystallogr. Reports* **65**, 596 (2020).
7. I.S. Lyubutin, N.I. Snegirev, M.A. Chuev, S.S. Starchikov, E.S. Smirnova, M.V. Lyubutina, S.V. Yagupov, M.B. Strugatsky, and O.A. Alekseeva, *J. Alloys Compd.* **906**, 164348 (2022).
8. E.S. Smirnova, N.I. Snegirev, I.S. Lyubutin, S.S. Starchikov, V.V. Artemov, M.V. Lyubutina, S.V. Yagupov, M.B. Strugatsky, Y.A. Mogilenec, K.A. Seleznyova, and O.A. Alekseeva, *Acta Crystallogr. Sect. B Struct. Sci. Cryst. Eng. Mater.* **76**, 1100 (2020).
9. S. Yagupov, M. Strugatsky, K. Seleznyova, Y. Mogilenec, N. Snegirev, N.V. Marchenkov, A.G. Kulikov, Y.A. Eliovich, K.V. Frolov, Y.L. Ogarkova, and I.S. Lyubutin, *Cryst. Growth Des.* **18**, 7435 (2018).
10. V.E. Dmitrienko, E.N. Ovchinnikova, S.P. Collins, G. Nisbet, G. Beutier, Y.O. Kvashnin, V.V. Mazurenko, A.I. Lichtenstein, and M.I. Katsnelson, *Nat. Phys.* **10**, 202 (2014).
11. N. Snegirev, E. Smirnova, I. Lyubutin, A. Kiiamov, S. Starchikov, S. Yagupov, M. Strugatsky, and O. Alekseeva, *IEEE Magn. Lett.* **13**, 1 (2022).
12. *Modern Mössbauer Spectroscopy*, ed. by Y. Yoshida and G. Langouche, Springer, Singapore (2021).
13. N.N. Greenwood and T.C. Gibb, *Mössbauer Spectroscopy*, Springer Netherlands, Dordrecht (1971); doi:10.1007/978-94-009-5697-1.
14. S.S. Hanna, J. Heberle, C. Littlejohn, G.J. Perlow, R.S. Preston, and D.H. Vincent, *Phys. Rev. Lett.* **4**, 28 (1960).
15. R.S. Preston, S.S. Hanna, and J. Heberle, *Phys. Rev.* **128**, 2207 (1962).
16. U. Gonser, *Mössbauer Spectroscopy II: the Exotic Side of the Method*, Springer (Berlin), Heidelberg, N.Y. (1981).
17. V.S. Shpinel, *Resonance of gamma-rays in crystals* [in Russian], Nauka, Moscow (1969).
18. P. Gütllich, E. Bill, and A.X. Trautwein, *Mössbauer spectroscopy and transition metal chemistry: Fundamentals and applications*, Springer, Berlin, N.Y. (2011); doi:10.1007/978-3-540-88428-6.
19. N. Snegirev, Y. Mogilenec, K. Seleznyova, I. Nauhatsky, M. Strugatsky, S. Yagupov, A. Kulikov, D. Zolotov, N. Marchenkov, K. Frolov, and I. Lyubutin, *IOP Conf. Ser. Mater. Sci. Eng.* **525**, 012048 (2019).
20. M.A. Chuev, *J. Phys. Condens. Matter* **23**, 426003 (2011).
21. M.A. Chuev, *JETP* **103**, 243 (2006).
22. V.A. Labushkin, V.G. Lomov, A.A. Faleev, and V.A. Figin, *Fiz. Tverd. Tela* **22**, 1725 (1980).
23. M. Strugatsky, *Isometric Iron Borate Single Crystals: Magnetic and Magnetoacoustic Effects*, V.I. Vernadsky Taurida National University, Simferopol (2008).
24. K. Seleznyova, E. Smirnova, M. Strugatsky, N. Snegirev, S. Yagupov, Y. Mogilenec, E. Maksimova, O. Alekseeva, and I. Lyubutin, *J. Magn. Mater.* **560**, 169658 (2022).

## Наклон и анизотропия дираковского спектра, вызванные перекрытием блоховских функций

З. З. Алисултанов<sup>+\*1)</sup>, Н. А. Демиров<sup>×</sup>

\*Московский физико-технический институт (МФТИ), Международный центр теоретической физики им. А. А. Абрикосова, 141701 Долгопрудный, Россия

<sup>×</sup>Институт физики, Дагестанский федеральный исследовательский центр РАН, 367015 Махачкала, Россия

<sup>+</sup>Объединенный институт высоких температур РАН (ОИВТРАН), 125412 Москва, Россия

Поступила в редакцию 13 апреля 2023 г.

После переработки 14 апреля 2023 г.

Принята к публикации 14 апреля 2023 г.

Показано, что в системах с дираковскими точками, возникающими при пересечении зон, принадлежащих эквивалентным представлениям группы симметрии возможно перекрытие этих зон. Такое перекрытие приводит к наклону и дополнительной анизотропии дираковского спектра, а также перенормировке скорости. В то же время, учет перекрытия не нарушает общих условий существования устойчивой точки пересечения зон. Эффективный дираковский гамильтониан при наличии перекрытия зон является псевдоэрмитовым и соответствует эффективному действию безмассового спинорного поля в искривленном пространстве-времени.

DOI: 10.31857/S1234567823100105, EDN: cnsjbg

Дираковские и вейлевские полуметаллы находятся в центре внимания многих исследователей из-за их уникальных свойств, таких как киральная аномалия, отрицательное магнитосопротивление, фермиарочные поверхностные состояния и т.д. [1]. В этих материалах реализуются так называемые безмассовые моды, подчиняющиеся уравнениям Дирака и Вейля [2, 3]. Трехмерные дираковские полуметаллы интересны с фундаментальной точки зрения тем, что они представляют собой удобную платформу для изучения  $3 + 1$  дираковского вакуума. В отличие от вейлевского полуметалла, в дираковском полуметалле линейный спектр образуется в результате пересечения вырожденных зон (см., например, [4, 5]). Возникновение дираковской точки в результате такого пресечения, как правило, защищено симметриями пространственной группы кристаллической решетки (самый известный пример – точки Дирака в графене [6, 7]), а не отличным от нуля числом Черна, как в вейлевских полуметаллах, или неэквивалентностью представлений группы симметрии зоны Бриллюэна, к которым принадлежат пересекающиеся зоны.

Отдельный интерес представляют дираковские системы с наклонным спектром. Такой спектр возникает при пересечении электронных и дырочных ферми-карманов [8–12]. В этой статье мы изучаем

возможности перекрытия зон в окрестности точки Дирака и индуцированный таким перекрытием наклон спектра. Про физические причины перекрытия зон будет упомянуто ниже. Здесь укажем на самые общие требования. В общем случае, такое перекрытие возможно, когда пересекающиеся зоны относятся к эквивалентным представлениям группы симметрии. Таким образом, мы изучаем ситуацию, когда с одной стороны между зонами имеется перекрытие, а с другой – эти зоны пересекаются в некоторых точках зоны Бриллюэна. Возможность существования таких устойчивых точек пересечения была предсказана еще в пионерской работе Херринга [13]. Согласно Херрингу, такие изолированные точки пересечения зон могут возникать в кристаллах без центра инверсии, причем они могут лежать в плоскости симметрии зоны Бриллюэна или в плоскости, перпендикулярной оси второго порядка. В кристаллах с центром инверсии пересечение зон, принадлежащих эквивалентным представлениям, также возможно, только областью пересечения будут не изолированные точки, а замкнутые кривые в зоне Бриллюэна. В настоящей работе нас интересует случай изолированных точек пересечения.

Покажем, что зоны, относящиеся к различным, но эквивалентным представлениям, могут перекрываться. Для этого необходимо показать, что интеграл перекрытия

<sup>1)</sup>e-mail: zaur0102@gmail.com

$$S_k^{\alpha\beta} = \int d^3\mathbf{r} \psi_k^{(\alpha)*} \psi_k^{(\beta)} \quad (1)$$

не обращается в нуль. В этом выражении  $k$  – это квантовое число, характеризующее зону (в нашем случае это волновой вектор), а верхние индексы  $(\alpha, \beta)$  обозначают различные представления группы, к которым относятся соответствующие зоны, т.е.

$$\psi_k^{(\alpha,\beta)} = \sum_q G_{kq}^{(\alpha,\beta)} \psi_q^{(\alpha,\beta)}. \quad (2)$$

Подставляя в (1) и суммируя обе части по всем элементам группы, получаем

$$gS_k^{\alpha\beta} = \sum_{qq'} \int d^3\mathbf{r} \psi_q^{(\alpha)*} \psi_{q'}^{(\beta)} \sum_G G_{kq}^{(\alpha)*} G_{kq'}^{(\beta)}, \quad (3)$$

где  $g$  есть размерность группы. Так как мы рассматриваем эквивалентные представления, то

$$G^{(\beta)} = AG^{(\alpha)}A^{-1}. \quad (4)$$

Учитывая это соотношение, из предыдущего равенства получаем

$$S_k^{\alpha\beta} = \frac{A_{kk}}{f_\alpha} \sum_{qq'} \int d^3\mathbf{r} \psi_q^{(\alpha)*} \psi_{q'}^{(\beta)} A_{qq'}^{-1}, \quad (5)$$

где мы воспользовались условием ортонормированности представления

$$\sum_G G_{ki}^{(\alpha)*} G_{mn}^{(\alpha)} = \frac{g}{f_\alpha} \delta_{km} \delta_{in}, \quad (6)$$

где  $f_\alpha$  есть размерность представления. Если учесть ортогональность блоховских зон по волновому вектору, то получаем

$$S_k^{\alpha\beta} = \frac{A_{kk}}{f_\alpha - 1} \sum_{q \neq k} S_q^{\alpha\beta} A_{qq}^{-1}. \quad (7)$$

Таким образом, интеграл перекрытия не обращается тождественно в нуль в случае различных, но эквивалентных неприводимых представлений. Легко показать, что в случае неэквивалентных представлений интеграл перекрытия тождественно обращается в нуль.

Получим эффективный дираковский гамильтониан и спектр в рамках двухзонной модели при наличии перекрытия между зонами. Для этого мы повторим простейший вывод двухзонного гамильтониана. Вектор состояния в двухзонной модели имеет вид  $|\Psi_{\mathbf{p}}\rangle = C_u |u_{\mathbf{p}}\rangle + C_v |v_{\mathbf{p}}\rangle$ , где амплитуда  $C_{u/v}$  соответствует блоховским функциям  $|u_{\mathbf{p}}\rangle / |v_{\mathbf{p}}\rangle$ . Умно-

жая слева волновое уравнение  $H |\Psi_{\mathbf{p}}\rangle = E_{\mathbf{p}} |\Psi_{\mathbf{p}}\rangle$  на  $\langle u_{\mathbf{p}}|$  и  $\langle v_{\mathbf{p}}|$ , получим систему уравнений

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{uu}^{\mathbf{p}} & \mathcal{H}_{uv}^{\mathbf{p}} \\ \mathcal{H}_{vu}^{\mathbf{p}} & \mathcal{H}_{vv}^{\mathbf{p}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_u \\ C_v \end{pmatrix} = \\ & = E_{\mathbf{p}} \begin{pmatrix} S_{uu}^{\mathbf{p}} & S_{uv}^{\mathbf{p}} \\ S_{vu}^{\mathbf{p}} & S_{vv}^{\mathbf{p}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_u \\ C_v \end{pmatrix} = \\ & = [f_0(\mathbf{p}) + \sigma_i f_i(\mathbf{p})] \begin{pmatrix} C_u \\ C_v \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (8)$$

где  $\mathcal{H}_{ab}^{\mathbf{p}} = \langle a_{\mathbf{p}} | \mathcal{H} | b_{\mathbf{p}} \rangle$  есть матричный элемент гамильтониана с  $a, b = u, v$ , а  $S_{\mathbf{p}}^{ab} = \langle a_{\mathbf{p}} | b_{\mathbf{p}} \rangle = \int a_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}) b_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}$  есть интеграл перекрытия зон,  $\sigma_i$  есть матрица Паули с  $i = x, y, z$ , а  $f_0(\mathbf{p})$  умножается на единичную матрицу  $2 \times 2$ . Обычно блоховские функции считаются ортогональными, так что матрица перекрытия в (8) становится единичной  $S_{\mathbf{p}}^{ab} = \delta_{ab}$ . Однако в реальных материалах это, строго говоря, не так (например, одной из главных причин такого являются многочастичные эффекты) [14–19]. Возможность перекрытия блоховских функций можно увидеть и из простых рассуждений. Для этого введем блоховские функции в простейшем виде  $u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{p}(\mathbf{r}-\mathbf{R})} \phi_u(\mathbf{r}-\mathbf{R})$  и  $v_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{p}(\mathbf{r}-\mathbf{R})} \phi_v(\mathbf{r}-\mathbf{R})$ , где  $\phi_u, \phi_v$  есть атомные орбитали, соответствующие зонам  $u, v$ , а  $\mathbf{R}$  есть радиус-вектор атома в узле решетки. Тогда интеграл перекрытия может быть записан в следующем виде:

$$\begin{aligned} & \int u_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}) v_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \\ & = \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} e^{i\mathbf{p}(\mathbf{R}-\mathbf{R}')} \int \phi_u^*(\mathbf{r}-\mathbf{R}') \phi_v(\mathbf{r}-\mathbf{R}) d^3\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (9)$$

Орбитали, соответствующие данному атому ( $\mathbf{R} = \mathbf{R}'$ ), всегда ортогональны:  $\int \phi_u^*(\mathbf{r}-\mathbf{R}') \phi_v(\mathbf{r}-\mathbf{R}) d^3\mathbf{r} = \delta_{ab}$ . Однако, для различных атомов  $\mathbf{R} \neq \mathbf{R}'$ , строго говоря, такой ортогональности нет, что приводит к отличным от нуля недиагональным элементам матрицы перекрытия  $S_{\mathbf{p}}^{ab}$ . Это дает ненулевое перекрытие между блоховскими зонами. Следует при этом отметить, что в самой точке вырождения перекрытие тождественно обращается в нуль из-за теоремы Крамера. Действительно, согласно этой теореме в точке пересечения  $\mathbf{p}_0$  существует связь между зонами  $\mathcal{T} |u_{\mathbf{p}_0}\rangle = |v_{\mathbf{p}_0}\rangle$ , где  $\mathcal{T}$  – оператор обращения времени. Тогда можно показать, что  $\langle u_{\mathbf{p}_0} | \mathcal{T} u_{\mathbf{p}_0} \rangle = 0$  [20, 21]. Уравнение (8) можно переписать в виде

$$(S_{\mathbf{p}})^{-1} [f_0(\mathbf{p}) + \sigma_i f_i(\mathbf{p})] \begin{pmatrix} C_u \\ C_v \end{pmatrix} = \tilde{\mathcal{H}} \begin{pmatrix} C_u \\ C_v \end{pmatrix}, \quad (10)$$

где  $S_{\mathbf{p}}^{ab}$  есть матрица в правой части уравнения (8). В окрестности точки Дирака мы имеем  $f_i(\mathbf{p}) \approx v_F p_i$  и  $f_0(\mathbf{p}) = 0$ . Если записать компоненты интеграла перекрытия в виде  $S_{\mathbf{p}}^{uu(vv)} = 1$  (это следует из нормировки функций Блоха),  $S_{\mathbf{p}}^{uv} = (i\vartheta_y - \vartheta_x)/v_F = (S_{\mathbf{p}}^{vu})^*$ , то соответствующий эффективный гамильтониан  $\tilde{\mathcal{H}} = (S_{\mathbf{p}}^{ab})^{-1} [f_0(\mathbf{p}) + \sigma_i f_i(\mathbf{p})]$  принимает вид

$$\tilde{\mathcal{H}} = \frac{1}{1 - \beta^2} (\boldsymbol{\vartheta} \cdot \mathbf{p} + \boldsymbol{\sigma} \cdot (v_F \mathbf{p} + i [\mathbf{p} \times \boldsymbol{\vartheta}])), \quad (11)$$

где  $\beta = \vartheta/v_F$ ,  $\vartheta = |\boldsymbol{\vartheta}|$ . Спектр такого гамильтониана имеет вид

$$\varepsilon(p) = \frac{\boldsymbol{\vartheta} \cdot \mathbf{p} \pm \sqrt{(\boldsymbol{\vartheta} \cdot \mathbf{p})^2 + (1 - \beta^2)v_F^2 p^2}}{1 - \beta^2}. \quad (12)$$

Как видно, в гамильтониане из-за перекрытия возникает новый векторный параметр  $\boldsymbol{\vartheta} = (\vartheta_x, \vartheta_y, 0)$ , приводящий к наклону спектра. На рисунке 1 показан спектр при различных значениях параметра перекрытия. Далее в статье мы полагаем, что  $v_F = 1$ .

Заметим, что гамильтониан (11) является неэрмитовым. Однако спектр такого гамильтониана действителен. Это связано с тем, что в действительности этот гамильтониан является псевдоэрмитовым, т.е. обладает свойством

$$\tilde{\mathcal{H}}^\dagger = \eta \tilde{\mathcal{H}} \eta^{-1}, \quad (13)$$

где оператор  $\eta$  может быть представлен в виде  $\eta = D^\dagger D$ , где  $D$  есть некоторый невырожденный оператор. Условие псевдо-эрмитовости (13) является более общим условием действительности спектра гамильтониана [22–25]. Для эрмитового гамильтониана оператор  $D$  унитарен и условие (13) превращается в обычное условие эрмитовости. Покажем, что для нашего гамильтониана (11) это условие выполняется всегда из-за того, что  $\beta < 1$ . Необходимо доказать, что условие

$$\eta \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + i [\mathbf{p} \times \boldsymbol{\vartheta}]) \eta^{-1} = \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} - i [\mathbf{p} \times \boldsymbol{\vartheta}]) \quad (14)$$

с  $\eta = D^\dagger D$  выполняется при  $\vartheta < 1$ . Из эрмитовости матрицы  $\eta = D^\dagger D$  следует общий вид этой матрицы

$$\eta = a_0 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a}, \quad (15)$$

где  $a_0, \mathbf{a} \in \mathbb{R}$ . Условие (14) теперь переписывается в виде

$$\begin{aligned} (a_0 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a}) (1 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\vartheta}) \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} &= \\ = (1 - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\vartheta}) \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} (a_0 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a}). \end{aligned} \quad (16)$$

Это условие выполняется при  $a_0 = 1$  и  $\mathbf{a} = -\boldsymbol{\vartheta}$ . Если представление  $\eta = D^\dagger D$  возможно, то  $\det \eta = \det (D^\dagger D) = |\det (D)|^2 > 0$ . Отсюда следует, что

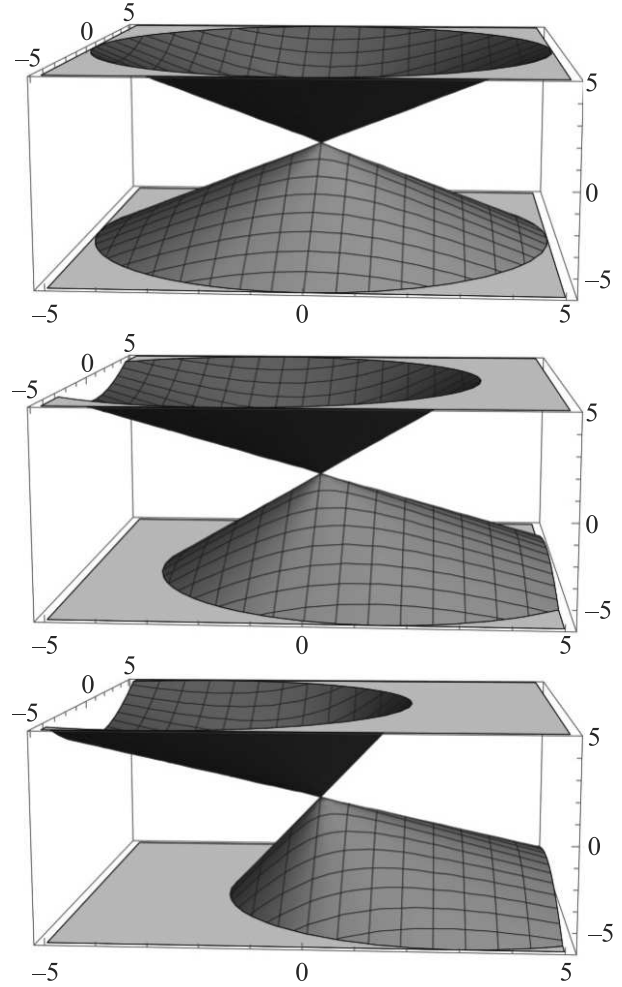


Рис. 1. (Цветной онлайн) Зависимость энергии от импульса (12) при  $p_z = 0$  при наличии перекрытия, которое для простоты задано в виде  $\boldsymbol{\vartheta} = (\vartheta_x, 0, 0)$ . Верхний рисунок соответствует  $\vartheta_x = 0$ , средний  $\vartheta_x = 0.3$ , нижний  $\vartheta_x = 0.6$ . По горизонтальным осям отложены  $(p_x, p_y)$

$a_0^2 - a_i^2 > 0$ . Другими словами, если  $a_0^2 - a_i^2 < 0$ , то представление  $\eta = D^\dagger D$  невозможно и условие действительности спектра (13) не выполняется. Таким образом, мы приходим к выводу, что спектр гамильтониана (11) вещественен при  $\vartheta < 1$ . В частности, это означает, что топологические характеристики такого гамильтониана ничем не отличаются от случая простого дираковского гамильтониана  $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}$ .

Можно подумать, что при наличии перекрытия между зонами изменятся условия существования точек контакта этих зон, полученных впервые в [13]. В частности, это могло бы привести к устранению точек контакта и открытию щели. Давайте повторим вывод поведения энергетического спектра вблизи контакта в рамках  $\mathbf{kp}$ -приближения при наличии



перекрытия. В рамках теории **к**p-приближения (межэлектронное взаимодействие  $V$  учитывается в рамках приближения Хартри) имеем

$$\left[ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} - \frac{i\hbar^2}{m} \mathbf{k} \cdot \nabla + \frac{\hbar^2}{2m} + V \right] |u_{\mathbf{k}}\rangle = E_{\mathbf{k}} |u_{\mathbf{k}}\rangle. \quad (17)$$

Согласно стандартной процедуре, в окрестности контакта  $\mathbf{k} + \boldsymbol{\kappa}$ , где  $\boldsymbol{\kappa}$  есть малое отклонение, величина  $-\frac{i\hbar^2}{m} \boldsymbol{\kappa} \cdot \nabla$  рассматривается как возмущение. При наличии перекрытия получим следующее выражение для изменения энергии  $\delta E(\mathbf{k} + \boldsymbol{\kappa})$  при малом отклонении от контакта

$$\begin{aligned} \delta E(\mathbf{k} + \boldsymbol{\kappa}) &= \\ &= \pm \frac{\sqrt{(\boldsymbol{\kappa} \cdot \bar{\mathbf{f}})^2 + (\boldsymbol{\kappa} \cdot \text{Reg})^2 + (\boldsymbol{\kappa} \cdot \overline{\text{Img}})^2}}{1 - \vartheta_x^2} + o(\kappa^2), \end{aligned} \quad (18)$$

где  $\bar{\mathbf{f}} = \mathbf{f} + i\vartheta_x \text{Img}$ ,  $\overline{\text{Img}} = \text{Img} - i\vartheta_x \mathbf{f}$  и мы для простоты положили  $\boldsymbol{\vartheta} = (\vartheta_x, 0, 0)$ , а вектора  $\mathbf{f}$  и  $\mathbf{g}$

$$\mathbf{f} = -i \frac{\hbar^2}{m} [\langle u_{\mathbf{k}} | \nabla u_{\mathbf{k}} \rangle - \langle v_{\mathbf{k}} | \nabla v_{\mathbf{k}} \rangle], \quad (19)$$

$$\mathbf{g} = i \frac{\hbar^2}{m} \langle u_{\mathbf{k}} | \nabla v_{\mathbf{k}} \rangle. \quad (20)$$

Достаточное условие существования контакта сводится к тому, чтобы ни один из трех векторов  $\mathbf{f} + i\vartheta_x \text{Img}$ ,  $\text{Reg}$ ,  $\text{Img} - i\vartheta_x \mathbf{f}$  тождественно не обращался в нуль. Если какой-нибудь из этих векторов тождественно обращается в нуль, то всегда будет существовать направление  $\boldsymbol{\kappa}$ , для которого остальные два вектора будут в перпендикулярной плоскости. В этом направлении спектр будет квадратичен по импульсу (так как линейный член ряда Тейлора тождественно обращается в нуль), т.е. любое сколь угодно малое возмущение может создать разрыв зон. При наличии центра инверсии вектор  $\text{Reg}$  всегда равен нулю. Следовательно, в этом случае не будет изолированной точки контакта зон. При отсутствии центра инверсии, вообще говоря, тождественно в нуль не обращается ни один из векторов. Для каких-то направлений  $\boldsymbol{\kappa}$  при наличии перекрытия можно ожидать, что  $\text{Img} - i\vartheta_x \mathbf{f} = 0$ . Но такое равенство возможно только при  $\text{Img} = \mathbf{f} \equiv 0$ , так как вектор  $\mathbf{f}$  действительный. Однако, даже если предположить, что вектор  $\mathbf{f}$  стал по каким-то причинам комплексным, то и в этом случае условия  $\text{Img} - i\vartheta_x \mathbf{f} = 0$  еще не достаточно, чтобы контакт исчез. Должно еще выполняться дополнительное условие  $\mathbf{f}, \text{Reg} \perp \boldsymbol{\kappa}$  для данного направления вектора  $\boldsymbol{\kappa}$ . Таким образом, мы приходим к выводу,

что обращение в нуль подкоренного выражения в изолированной точке возможно только при условии, что три вектора  $\mathbf{f}, \text{Reg}, \text{Img}$  компланарны, либо хотя бы один из них тождественно обращается в нуль. Это полностью совпадает с выводами работы [13], т.е. учет перекрытия влияет только на форму спектра и не затрагивает фундаментальные условия существования точки Дирака.

Выше мы показали, что перекрытие между зонами приводит к наклону спектра. Однако, если в точке Дирака пересекаются электронные и дырочные ферми-карманы, то спектр имеет наклон и без перекрытия. Наличие же последнего приводит лишь к дополнительному наклону. Общий гамильтониан, содержащий наклон и перекрытие имеет вид (вывод такой же, что и в случае спектра без наклона, только надо положить  $f_0(\mathbf{p}) = \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{p}$ )

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{H}} &= \frac{1}{1 - \beta^2} [(\boldsymbol{\omega} + \boldsymbol{\vartheta}) \cdot \mathbf{p} + \\ &+ \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + (\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{p}) \boldsymbol{\vartheta} + i[\mathbf{p} \times \boldsymbol{\vartheta}])]. \end{aligned} \quad (21)$$

Теперь гамильтониан содержит два параметра  $\boldsymbol{\omega}$ ,  $\boldsymbol{\vartheta}$ . Сразу заметим, что при  $\boldsymbol{\vartheta} = -\boldsymbol{\omega}$  наклон исчезает полностью. Таким образом, перекрытие между зонами может привести к тому, что спектр становится прямым. В системе с двумя точками Дирака вектор наклона имеет противоположные знаки в различных точках. Это означает, что за счет перекрытия наклон исчезнет при  $\boldsymbol{\vartheta} = -\boldsymbol{\omega}$  только в одной из точек. Таким образом, возможна фаза, когда в одной точке дирака спектр наклонный, а в другой – прямой. Можно подумать, что в таком случае возникнет равновесный ток из-за отличного от нуля суммарного наклона от двух точек. Однако анизотропия спектра такова, что равновесный ток по-прежнему равен нулю. На рисунке 2 приведены спектры (поверхности постоянной энергии) для различных значений параметра перекрытия при наличии наклона.

Наконец, заметим, что гамильтониан (21) соответствует действию спинорного поля в искривленном пространстве-времени. Это можно увидеть, если в рамках тетрадного формализма в общем лагранжиане

$$\mathcal{L} = i\bar{\psi} \gamma^\nu e_\nu^\mu \partial_\mu \psi \quad (22)$$

положить  $e_\nu^\mu = v_F \delta_\nu^\mu + \delta_\nu^0 \omega^i \delta_i^\mu + \vartheta_i \delta_\nu^i \delta_0^\mu$ . Такие вейлевские фермионы были предложены в работах [26, 27]. Отличие от нуля компонент  $e_i^0, e_0^i$  тетрады (эти компоненты равны  $e_i^0 = \vartheta_i, e_0^i = \omega^i$ ) говорит об искривленности пространства-времени. Один из основных выводов настоящей работы состоит в том, что тако-

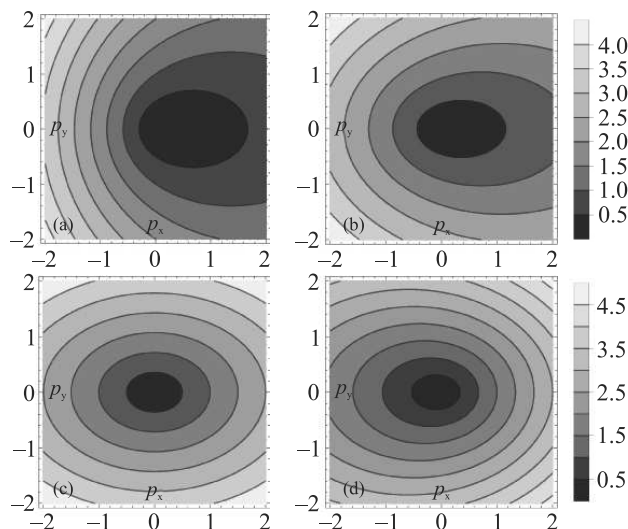


Рис. 2. (Цветной онлайн) Спектр (поверхности постоянной энергии) гамильтониана (21) при  $p_z = 0$  при наличии наклона  $\omega = (-0.7, 0, 0)$  при различных значениях перекрытия  $\vartheta = (\vartheta_x, 0, 0)$ : (a) –  $\vartheta_x = 0$ ; (b) –  $\vartheta_x = 0.4$ ; (c) –  $\vartheta_x = 0.7$ ; (d) –  $\vartheta_x = 0.8$

му лагранжиану в точности соответствует гамильтониан (21). Это можно увидеть, составив уравнение Эйлера–Лагранжа. Таким образом, учет перекрытия между зонами эффективно проявляется как искривление пространства-времени для спинорного дираковского поля. Это дает уникальную возможность моделировать в таких дираковских системах различные экзотические явления, связанные с искривлением пространства-времени. В этой связи необходимо упомянуть работу [28] (см. также работу Вильчека с соавторами [29]), в которой неоднородные вейлевские спектры с наклоном были использованы для эффективного моделирования горизонта событий вблизи черных и белых дыр. Однако, такие спектры не содержат связи между пространственными компонентами матрицы Дирака и временной компонентой импульса (тетрада  $e_i^0$ ), и поэтому не позволяют моделировать все особенности искривленного пространства-времени. Этот недостаток компенсируется перекрытием, за счет которого и возникает не хватающий по симметрии вклад компоненты  $e_i^0$ .

Итак, в этой работе мы изучили эффекты перекрытия зон на дираковский гамильтониан. Эти эффекты должны быть учтены при анализе различных явлений в дираковских системах с наклонным спектром (см., например, [30–33]).

Работа поддержана грантом Российского научного фонда # 22-72-00110.

1. N. P. Armitage, E. J. Mele, and A. Vishwanath, *Rev. Mod. Phys.* **90**, 015001 (2018).
2. P. A. Dirac, *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **117**, 610 (1928).
3. H. Weyl, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **15**(4), 323 (1929).
4. S. Murakami, *New J. Phys.* **9**(9), 356 (2007).
5. S. Murakami, S. Iso, Y. Avishai, M. Onoda, and N. Nagaosa, *Phys. Rev. B* **76**, 205304 (2007).
6. M. Katsnelson, *Graphene: Carbon in Two Dimensions*, Cambridge University Press, Cambridge (2012).
7. E. Kogan and V. U. Nazarov, *Phys. Rev. B* **85**, 115418 (2012).
8. B. Bradlyn, J. Cano, Z. Wang, M. Vergniory, C. Felser, R. Cava, and B. A. Bernevig, *Science* **353**, aaf5037 (2016).
9. A. A. Soluyanov, D. Gresch, Z. Wang, Q. Wu, M. Troyer, X. Dai, and B. A. Bernevig, *Nature* **527**(7579), 495 (2015).
10. B. J. Wieder, Y. Kim, A. M. Rappe, and C. L. Kane, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 186402 (2016).
11. З. З. Алисултанов, *ЖЭТФ* **152**(5), 986 (2017).
12. З. З. Алисултанов, *Письма в ЖЭТФ* **107**(4), 260 (2018).
13. C. Herring, *Phys. Rev.* **52**, 365 (1937).
14. E. Antoncik and P. T. Landsberg, *Proc. Phys. Soc.* **82**, 337342 (1963).
15. V. Halpern, *J. Phys. Chem. Solids* **24**, 14951502 (1963).
16. N. Bernstein, M. J. Mehl, and D. A. Papaconstantopoulos, *Phys. Rev. B* **66**, 075212 (2002).
17. W. A. Harrison and S. Ciraci, *Phys. Rev. B* **10**, 1516 (1974).
18. J. Tejada and N. J. Shevchik, *Phys. Rev. B* **13**, 2548 (1976).
19. T. B. Boykin, P. Sarangapani, and G. Klimeck, *J. Appl. Phys.* **125**, 144302 (2019).
20. C. Herring, *Phys. Rev.* **52**, 361 (1937).
21. C. Kittel, *Quantum Theory of Solids*, Wiley, N.Y. (1963).
22. A. Mostafazadeh, *J. Math. Phys.* **43**, 205214 (2002).
23. A. Mostafazadeh, *J. Math. Phys.* **43**, 28142816 (2002).
24. A. Mostafazadeh, *J. Math. Phys.* **43**, 39443951 (2002).
25. Z. Z. Alisultanov and E. G. Idrisov, *Phys. Rev. B* **107**, 085135 (2023).
26. J. Nissinen and G. E. Volovik, *JETP Lett.* **105**, 442 (2017).
27. J. Nissinen and G. E. Volovik, *JETP* **127**, 948957 (2018).
28. G. E. Volovik, Black hole and Hawking radiation by type-II Weyl fermions, *JETP Lett.* **104**, 645 (2016), arXiv:1610.00521

- 
29. Y. Kedem, E. J. Bergholtz, and F. Wilczek, *Phys. Rev. Research* **2**, 043285 (2020).
30. I. Proskurin, M. Ogata, and Y. Suzumura, *Phys. Rev. B* **91**, 195413 (2015).
31. M. Milićević, G. Montambaux, T. Ozawa, O. Jamadi, B. Real, I. Sagnes, A. Lemaître, L. Le Gratiet, A. Harouri, J. Bloch, and A. Amo *Phys. Rev. X* **9**, 031010 (2019).
32. A. Wild, E. Mariani, and M. E. Portnoi, *Phys. Rev. B* **105**, 205306 (2022).
33. Y. Yekta, H. Hadipour, and S. A. Jafari, *Commun. Phys.* **6**, 46 (2023).

# Теория функционала плотности, молекулярная динамика и AlteQ для исследования баймантуолоуоамида А и баймантуолоуоамида В и выявления потенциальных ингибиторов белков M<sup>Pro</sup> – новой мишени для лечения SARS COVID-19<sup>1)</sup>

К. Гурушанкар<sup>a,b,2),3)</sup>, С. К. Джеясилан<sup>c,d,3)</sup>, М. Гришина<sup>a</sup>, И. Сисванто<sup>e,3)</sup>, Р. Тивар<sup>f,3)</sup>,  
Н. Н. Т. Пуспанингсих<sup>g,3)</sup>

<sup>a</sup>Лаборатория компьютерного моделирования лекарственных средств Высшей медико-биологической школы Южно-Уральского государственного университета, 454080 Челябинск, Россия

<sup>b</sup>Department of Physics, Kalasalingam Academy of Research and Education, Krishnankoil, 626126 Tamilnadu, India

<sup>c</sup>Post Graduate & Research Department of Physics, N.M.S.S.V.N. College, Madurai, 625019 Tamilnadu, India

<sup>d</sup>Post Graduate Department of Physics, Mannar Thirumalai Naciker College, Madurai, 625004 Tamilnadu, India

<sup>e</sup>Bioinformatic Laboratory, UCoE Research Center for Bio-Molecule Engineering Universitas Airlangga, 60115 Surabaya, Indonesia

<sup>f</sup>Department of Physics, Coordinator Research and Development Cell, Dr CV Raman University, Kargi Kota, 495113 Bilaspur CG, India

<sup>g</sup>Department of Chemistry, Faculty of Science and Technology, Universitas Airlangga, 60115 Surabaya, Indonesia

Поступила в редакцию 2 января 2023 г.

После переработки 12 апреля 2023 г.

Принята к публикации 13 апреля 2023 г.

COVID-19 привел к эпидемическим условиям во всем мире. Несмотря на усилия ученых всего мира по разработке эффективных лекарств против этого вируса, в настоящее время не существует признанного лекарства от COVID-19. Успешные методы лечения различных заболеваний основаны на использовании натуральных компонентов, содержащихся в лекарственных растениях, что также имеет решающее значение для разработки новых лекарств. Это исследование направлено на то, чтобы понять роль молекул баймантуолоуоамида А (baia) и баймантуолоуоамида В (baib) в лечении COVID-19. Первоначально теория функционала плотности (DFT) с базисным набором Becke3-Lee-Yang-Parr (B3LYP) 6-311 + G(d, p) использовалась для изучения их электронных потенциалов. Ряд характеристик, в том числе разность между энергиями низшей свободной (НСМО) и высшей занятой (ВЗМО) молекулярными орбиталями, жесткость и мягкость, электроотрицательность и электрофильность также были рассчитаны для обсуждения реакционной способности молекул. С использованием метода NBO (Natural Bond Orbital) исследована биологически активная природа и стабильность указанных соединений. Кроме того, оба соединения являются потенциальными ингибиторами основной протеазы (M<sup>Pro</sup>). Проведено моделирование молекулярной динамики и методом AlteQ.

DOI: 10.31857/S1234567823100117, EDN: coeqll

**1. Введение.** Начиная с более ранних стадий этой пандемии, всемирные усилия были направлены на производство вакцин и противовирусных препаратов для борьбы с этим вирусом. Новый коронавирус в первую очередь вызывает тяжелый острый респираторный синдром (SARS), взаимодействуя с

рецепторами ACE-2 и корецепторами TMPRSS для праймирования S-белка [1–4]. В дополнение к первичной протеазе (3CL-pro) и папаиноподобной протеазе он также кодирует цистеиновую протеазу, сериновую протеазу (PLpro). Они могут участвовать в расщеплении вирусных полипротеинов [5], что приводит к созданию активных веществ для репликации вируса внутри клетки-хозяина. Одной из наиболее интригующих молекулярных мишеней для разработки препаратов против SARS является главная пептидаза (M<sup>Pro</sup>) коронавируса (CoV), вызы-

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

<sup>2)</sup>e-mail: [gurushankar01051987@gmail.com](mailto:gurushankar01051987@gmail.com)

<sup>3)</sup>K. Gurushankar, S. Ch. Jeyaseelan, I. Siswanto, R. Tiwari, N. N. T. Puspaningsih.

вающего тяжелый острый респираторный синдром (SARS). В этой ситуации разработка натуральных лекарственных средств может помочь ограничить передачу вируса [6]. По сравнению с традиционными методами поиска лекарств, которые часто занимают много времени, вычислительные подходы обеспечивают удобный и эффективный способ обнаружения новых соединений, особенно важных в условиях нынешней пандемии. Фармакологическая мишень 3CLpro/Mpro (идентификатор PDB: 2GTB) широко исследуется для разработки лекарств для борьбы с COVID-19 и считается одной из наиболее изученных мишеней. На это указывает обилие патентов и потенциальных кандидатов в лекарства [7]. Это протеолитический фермент, необходимый для расщепления вирусного полипротеина на несколько функционально активных белковых единиц. Его выбор в качестве фармакологической мишени в данном исследовании оправдан тем, что его активный сайт полностью консервативен и невосприимчив к мутациям. Основная протеаза 2GTB, обнаруженная в CoV, связанном с тяжелым острым респираторным синдромом (SARS), демонстрирует 96 % сходство с основной протеазой 2019-nCov [8].

Взаимодействие между лекарством и его мишенью является наиболее важным этапом фармакологического действия. На размещение лекарства в рецепторном кармане влияют водородные связи, короткие контакты и ван-дер-ваальсовы взаимодействия. Предлагаемый подход может быть использован как альтернативный метод определения межмолекулярных взаимодействий металлосодержащих комплексов в различных системах (фермент-лиганд, реагент-субстрат). Молекулярные участки определяются всеми этими взаимодействиями, обеспечивающими комплементарность лиганд-рецептор [9]. Недавно с помощью метода AlteQ были изучены различные фермент-лигандные комплексы (комплексы циклинзависимой протеинкиназы, мышинной ацетилхолинэстеразы, протеазы ВИЧ-1 и EGFR) [10–12]. Кроме того, Palko et al., 2021 предложили использовать метод AlteQ для прогнозирования биологической активности, молекулярного докинга и изучения механизмов действия лекарств [13]. В методе AlteQ использована высококачественная низкотемпературная рентгеновская дифракция с высоким разрешением для описания экспериментально определенных электронных плотностей. AlteQ – отличный инструмент для изучения электронных свойств крупных молекулярных структур [10–13]. Этот метод вычисляет электронную плотность в пространстве между рецептором и лигандом, используя атом-

ные вклады Слейтерого типа, и, поскольку их взаимодействия определяются перекрыванием электронных облаков, взаимодействия должны удовлетворять принципу максимальной комплементарности, можно получить уравнение, описывающее эти взаимодействия. Этот метод также оценивает качество взаимодействия между рецептором и лигандом, насколько комплементарны взаимодействия, и благодаря этому его используют для отбрасывания менее реалистичных структур, полученных методами докинга.

Впоследствии разработка лекарств *de novo* требует очень много времени (обычно от 10 до 15 лет, чтобы вывести новые лекарства на рынок). В связи с этим подходящим подходом считается либо перепрофилирование одобренных FDA лекарств, либо поиск небольших молекул из природных потребляемых источников, которые считаются безопасными или обладают незначительной токсичностью. Вычислительные методы или методы *in silico* представляют собой важный подход к перепрофилированию лекарств. Перепрофилирование лекарств является эффективным подходом к открытию лекарств [14–16]. Недавно сообщалось, что палбоциклиб, ингибитор CDK4/6, был одним из самых популярных препаратов для использования при лечении COVID-19. В качестве рецептора при развитии тяжелого острого респираторного синдрома коронавируса 2 (SARSCoV-2) можно рассматривать ангиотензинпревращающий фермент 2 (ACE2), чей уровень экспрессии тесно связан с инфекцией SARS-CoV-2 [17]. Ранее наша группа протестировала алкалоиды ba1a и ba1b и пришла к выводу, что ba1b обладает новыми структурными особенностями и является сильнодействующим ингибитором CDK4 [18]. Однако, насколько нам известно, для этих соединений не сообщалось ни об исследованиях теории функционала плотности (DFT), ни о проведении докинга. Основываясь на этих выводах, кажется важным полностью исследовать эти два соединения с точки зрения их потенциального применения.

Параллельно с этим для эффективного изучения фармакологической активности противовирусных препаратов в отношении ключевых ферментов SARS-CoV-2 применялись вычислительные стратегии, основанные на теории функционала плотности (DFT), молекулярном докинге и скрининге электронных баз данных [19–23]. В этих исследованиях DFT предоставила фундаментальную информацию, основанную на энергиях граничных орбиталей, их пространственном распределении и оптимизированных геометриях. Этот метод помог ученым оценить стабильность лекарств и рассчитать струк-

турные, электронные и термодинамические свойства [24]. Эти свойства были успешно использованы для лучшего понимания поведения лекарств в биологических системах [25, 26]. Энергии граничных молекулярных орбиталей коррелируют с расчетно и экспериментально определенными свойствами органических молекул, отобранных в качестве кандидатов в лекарства [27, 28]. Расул и др. исследовали ингибирующую активность 19 производных тиазолида в отношении  $M^{pro}$  и митилтрансфераз. Арафет и др. использовали гибридный метод M06-2X/6-31 +  $G(d, p)$ :AM1/ММ для исследования механизмов ингибирования известного ингибитора  $M^{pro}$ , N3, и создали энергетические профили для образования ковалентного комплекса с  $M^{pro}$ . Хренова и др. провели детальное динамическое исследование фермент-субстратного комплекса  $M^{pro}$ . Они оценили особенности электронной плотности комплекса и показали, что траектории QM/ММ-MD раскрывают реакционную способность субстрата в  $M^{pro}$  и хорошо согласуются с соответствующими экспериментальными данными.  $M^{pro}$  является предпочтительной мишенью для терапевтического дизайна SARS-CoV, и для эффективного воздействия на него был разработан широкий спектр лекарственных ингибиторов [29–31]. Предыдущие анализы геномных последовательностей показали, что SARS-CoV-2 взаимодействует с соответствующими вариантами SARS-CoV и MERS-CoV с высокой степенью сходства последовательностей [32]. Поэтому  $M^{pro}$  считается очень перспективной биологической мишенью для SARS-CoV-2.

В этой статье исследуется моделирование с помощью DFT, молекулярного докинга, молекулярной динамикой, метода AlteQ для исследования ингибирующего потенциала соединений ba1a и ba1b в отношении основной протеазы ( $M^{pro}$ ) вируса SARS-CoV-2. Сначала мы характеризуем соединения, указанные в заголовке, с точки зрения нескольких параметров реакционной способности, используя расчеты DFT. Затем мы используем молекулярный докинг, моделирование молекулярной динамикой и AlteQ вместе, чтобы исследовать и анализировать связывающее средство, режимы связывания и стабильность взаимодействия в активном центре SARS-CoV-2  $M^{pro}$ .

**2. Материалы и методы.** Баймантуолоуамид А (ba1a) и баймантуолоуамид В (ba1b) – амидные алкоиды – были выбраны из наших предыдущих отчетов и для дальнейших подробных теоретических расчетов были изучены следующим образом [18]. Используя анализ популяции Малликена, были получены функции Фукуи с использованием базисного набора 6-311 +  $G(d, p)$  при расчете энергий (*single point*)

для состояний молекулы N, N – 1 и N + 1. Программа GaussView 05 использовалась для отображения граничных молекулярных орбиталей молекулы и поверхности молекулярного электростатического потенциала [33]. Спектр плотности состояний (Density of States (DOS)) был подготовлен с использованием алгоритма Gausssum 3 [34].

### 3. Результаты и их обсуждение.

**3.1. Анализ FMO.** Химическая реакционная способность, кинетическая стабильность и химическая мягкость соединений ba1a и ba1b – все это характеристики, которые можно объяснить молекулярными орбиталями ВЗМО-НСМО молекулы. Графическое изображение ВЗМО, НСМО, ВЗМО-1, НСМО + 1, ВЗМО-2 и НСМО + 2 молекул ba1a и ba1b показано на рис. 1. Положительная и отрицательная фазы представлены красным и зеленым цветом соответственно. Графики показывают, что ВЗМО, НСМО, ВЗМО-1, НСМО + 1, ВЗМО-2 и НСМО + 2 прогнозируют изменение распределения электронной плотности вокруг всей молекулы. Это подтверждает наличие межмолекулярного переноса заряда в целевых молекулах. Были определены общая жесткость, химический потенциал, индекс электрофильности и мягкость молекул ba1a и ba1b, которые показаны вместе с другими молекулярными параметрами, связанными с FMO (см. дополнительные материалы, табл. S1). Таким образом, молекулярные свойства, связанные с ВЗМО-НСМО, используются для прогнозирования тенденции лекарственного средства к взаимодействию лекарство-акцептор [35]. Значения потенциала ионизации наблюдались выше по сравнению со значениями средства к электрону, характеризующими лучшую электронодонорную способность исследуемых молекул ba1a и ba1b. Было обнаружено, что общее значение жесткости составляет 2.248 и 2.214 для лигандов ba1a и ba1b. Общее значение мягкости было рассчитано как 0.445 и 0.452. Значения химической жесткости для ba1a и ba1b больше, чем их значения мягкости. Следовательно, более высокая химическая жесткость означает более низкую реакционную способность и более высокую стабильность. Значения химического потенциала ba1a ( $\mu = -3.840$ ) и ba1b ( $\mu = -3.612$ ) показывают, что ba1b более стабилен, чем ba1a. Значения показали, что лиганд ba1b является более реакционноспособным и имеет сильную тенденцию к образованию комплексов с различными металлами [33, 34].

**3.2. Анализ MEP.** Молекулярный электростатический потенциал (MEP) является очень полезным инструментом для анализа участков электронной плотности при рассмотрении электрофильных и нук-

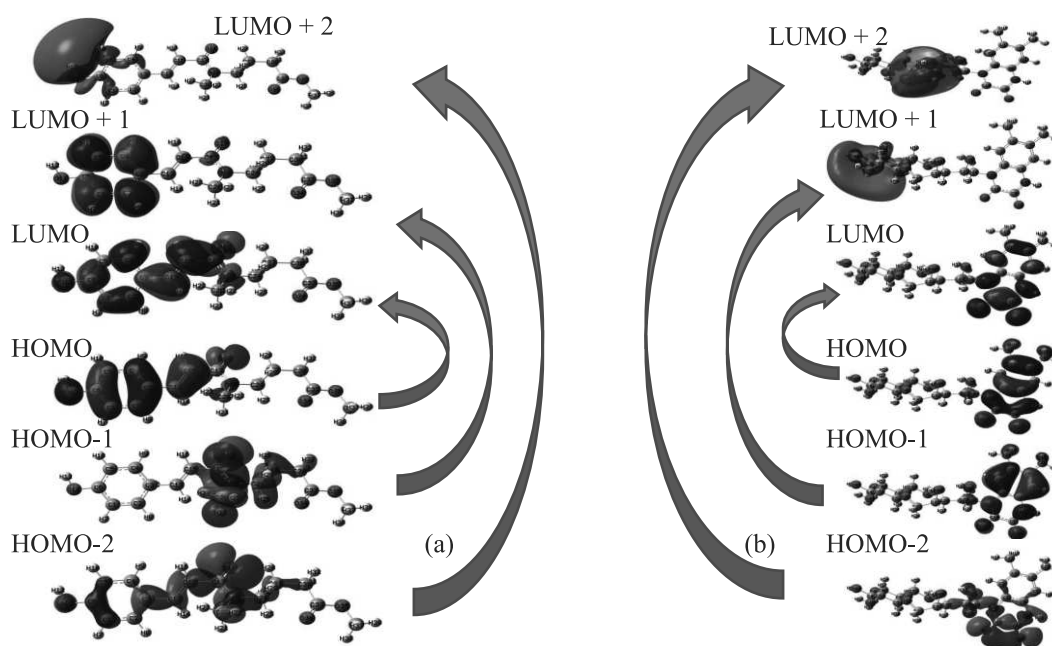


Рис. 1. (Цветной онлайн) Граничные молекулярные орбитали молекулы ba1a (a) и молекулы ba1b (b)

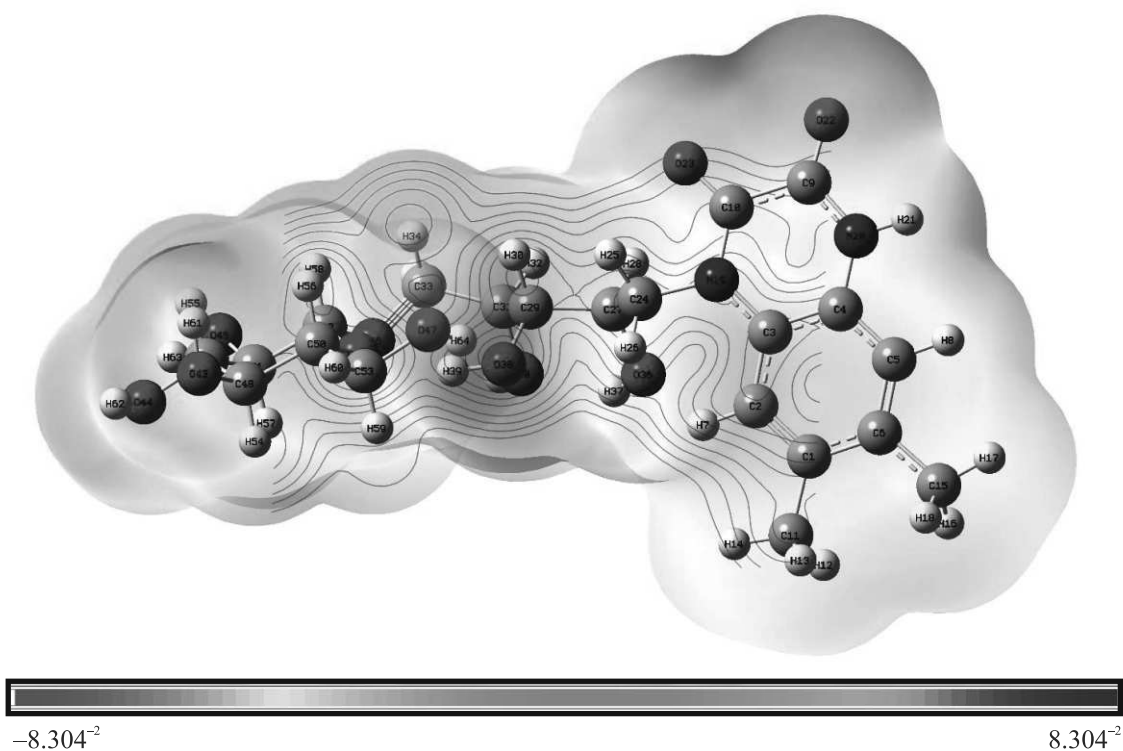


Рис. 2. (Цветной онлайн) Поверхность молекулярного электростатического потенциала молекулы ba1a

леофильных реакций, особенно для биомолекул и лекарств. Как правило, он предоставляет важную информацию о химической стабильности и реакцион-

ной способности органической молекулы для понимания электрофильных и нуклеофильных свойств. Нуклеофильные и электрофильные свойства иссле-

дованы и отмечены разными цветами. Синий цвет указывает на более высокий нуклеофильный потенциал, а красный цвет указывает на более высокий электрофильный потенциал. Электростатический потенциал обычно уменьшается в следующем порядке: синий < зеленый < желтый < оранжевый < красный. Электрофильные области в основном представлены вокруг атома O, а нуклеофильные потенциалы – вокруг атомов H и N в соединениях ba1a и ba1b, отмеченных на рис. 2 и 3. Эти центры реакционной способности позволяют соединениям связываться с заряженными системами в живых организмах, что подтверждает биоактивность [36].

3.3. *Распределение зарядов атомов по Малликену и локальные дескрипторы реакционной способности.* Показано рассчитанное по Малликену распределение атомного заряда молекул ba1a и ba1b (см. дополнительные материалы, табл. 2 и 3). Атом углерода C17 в молекуле ba1a имеет наибольший положительный заряд, потому что он соединен с электроотрицательными атомами кислорода (O18) и азота (N19). Предполагается, что гидроксильная группа, связанная с атомом кислорода фенильного кольца (O11), будет иметь наибольшее значение отрицательного заряда. Все атомы водорода имеют положительные значения заряда, в то время как кольцевые атомы углерода имеют как положительные, так и отрицательные значения заряда, что указывает на то, что заместители оказывают значительное влияние на атомы углерода. Вычисление функций Фукуи является эффективным способом определения реакционной способности каждого конкретного атома в молекуле. Он определяет предпочтительные области молекулы для конкретных химических атак [37, 38]. Молекулярная реакционная способность играет важную роль при разработке и синтезе новых фармацевтических соединений и используется для реализации биологической активности молекулы [39, 40]. Наиболее нуклеофильные участки молекулы ba1a расположены в порядке  $C20 > C24 > C37 > C3 = C30$ . Наиболее электрофильные участки молекулы расположены в порядке  $C24 > C36 > H23 > C37 > C30$ . Атомы O18 > H14 > C6 > C4 > H32 являются благоприятными атомными позициями для атаки радикалов.

Как и в случае с молекулой ba1b, атом углерода C9 имеет наибольший положительный заряд, так как присоединен к электроотрицательным атомам кислорода (O22) и азота (N20). Предполагалось, что атом азота будет иметь наибольшее значение отрицательного заряда (N20). Все атомы водорода имеют положительные значения заряда, в то время как коль-

цевые атомы углерода имеют как положительные, так и отрицательные значения заряда, что указывает на то, что заместители оказывают значительное влияние на атомы углерода. Наиболее нуклеофильные участки молекулы ba1b расположены в порядке  $C24 > O43 > O42 > C49 > C52 = C53$ . Наиболее электрофильные участки молекулы расположены в порядке  $C24 > O42 = H64 > C27 = C53 > C15$ . Атомы O23 > O22 > H8 > C9 > C10 являются благоприятными атомными позициями для атаки радикалов.

3.4. *Анализ FMO и плотность состояний (DOS).* Используя плотность состояний, можно визуализировать состав молекулярных орбиталей (МО) и его влияние на химическую связь. Спектр DOS моделировали путем свертки молекулярных орбиталей с гауссовыми кривыми единичной высоты. В спектре DOS занятые и виртуальные орбитали представлены зеленой и красной линиями соответственно. На рисунке 4 показан смоделированный спектр DOS для ba1a и ba1b.

3.5. *Анализ NBO.* Межмолекулярное и внутримолекулярное взаимодействие, определяемое через энергию стабилизации  $E(2)$ , изучали с помощью NBO-анализа. Большая величина  $E(2)$ , а значит более яркая способность к электронодонорным свойствам, т.е. переносу электронов от доноров к акцепторам, демонстрирует возможность взаимодействия между донорами электронов и акцепторами электронов. Донорно-акцепторные взаимодействия и связанные с ними энергии возмущений второго порядка приведены в дополнительных материалах в табл. S4 и S5. Перекрытие между связывающей  $\pi$  (C-C) орбиталью и антисвязывающей  $\pi^*$  (C-C) орбиталью приводит к гиперконъюгативным взаимодействиям. Это стабилизирующее взаимодействие вызывает внутримолекулярный перенос заряда (ICT) молекул ba1a и ba1b. Два сильных взаимодействия  $LP \rightarrow \pi^*$  в молекуле ba1a возникают за счет неподеленных пар атомов азота и кислорода, которые стабилизируют молекулу через  $LP(2) O35 \rightarrow \pi^*C33-O34$  и  $LP(1) N19 \rightarrow \pi^*C17-O18$  с энергиями стабилизации 46.53 кДж/моль и 39.01 ккал/моль соответственно. В молекуле ba1b сильное  $LP \rightarrow \sigma^*$  взаимодействие возникает за счет неподеленных пар атомов кислорода, которые стабилизируют молекулу через  $LP(2) O38 \rightarrow \sigma^*O42-C52$ ,  $LP(1) O47 \rightarrow \sigma^*O42-C52$  и  $LP(1) O47 \rightarrow \sigma^*C53-H60$  с энергиями стабилизации 105.18, 107.49 и 112.04 ккал/моль соответственно. Это стабилизирующее взаимодействие между LP-орбиталями и  $\sigma^*$ -орбиталями является характерной чертой биологической активности молекулы.



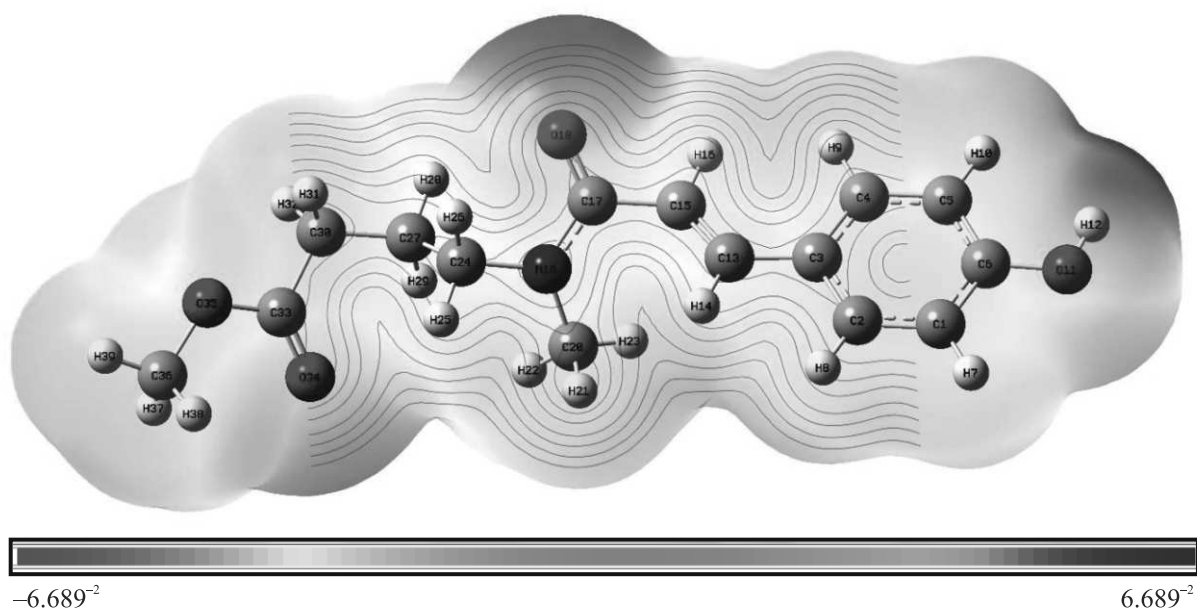


Рис. 3. (Цветной онлайн) Поверхность молекулярного электростатического потенциала молекулы baib

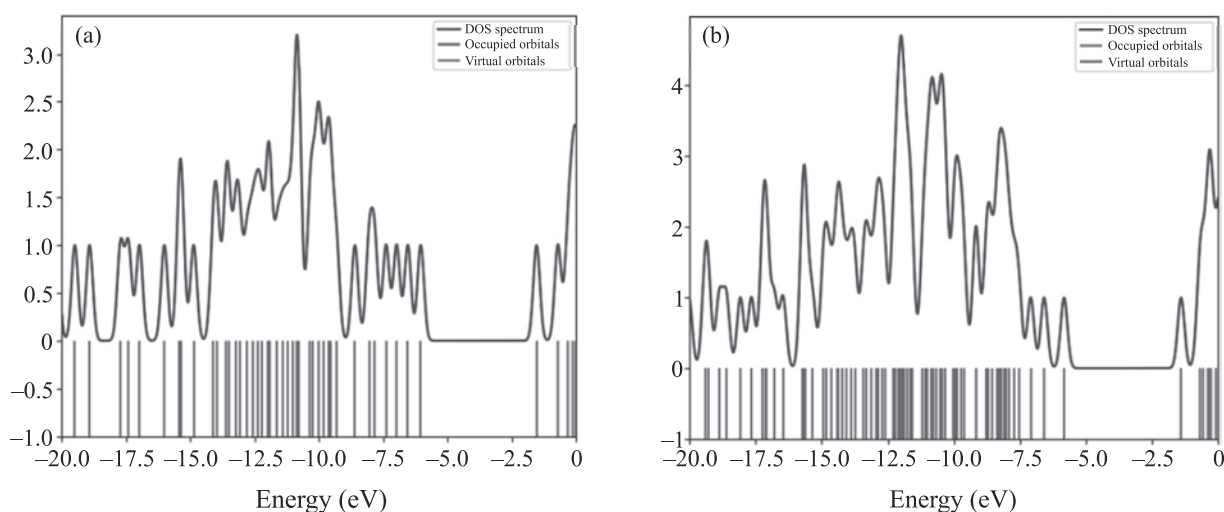


Рис. 4. (Цветной онлайн) Спектр DOS для молекул baia (a) и baib (b)

3.6. Анализ данных Молекулярно-динамического моделирования.

3.6.1. Конформационная динамика каждой системы: стабильность, гибкость и компактность. Конформационная динамика каждой системы оценивается через несколько переменных, таких как стабильность, гибкость и компактность [41, 42]. Анализ устойчивости системы может быть выполнен путем сходимости полной энергии в каждой системе. Результаты показывают, что в каждой системе нет чрезмерных колебаний энергии (см. дополнительные

материалы, рис. S3). Кроме того, расчет среднеквадратичного отклонения (RMSD) направлен на определение стабильности каждой системы в виде комплекса, несвязанных пептида и лиганда (см. дополнительные материалы, рис. S4). В частности, RMSD комплекса показывает решающее влияние в стабилизации лиганда и белка [42]. Результаты показали, что RMSD комплекса существенно не колебался во время моделирования в течение 40 нс. Это свидетельствует о том, что с течением времени взаимодействие между лигандом и рецептором носит стабильный ха-

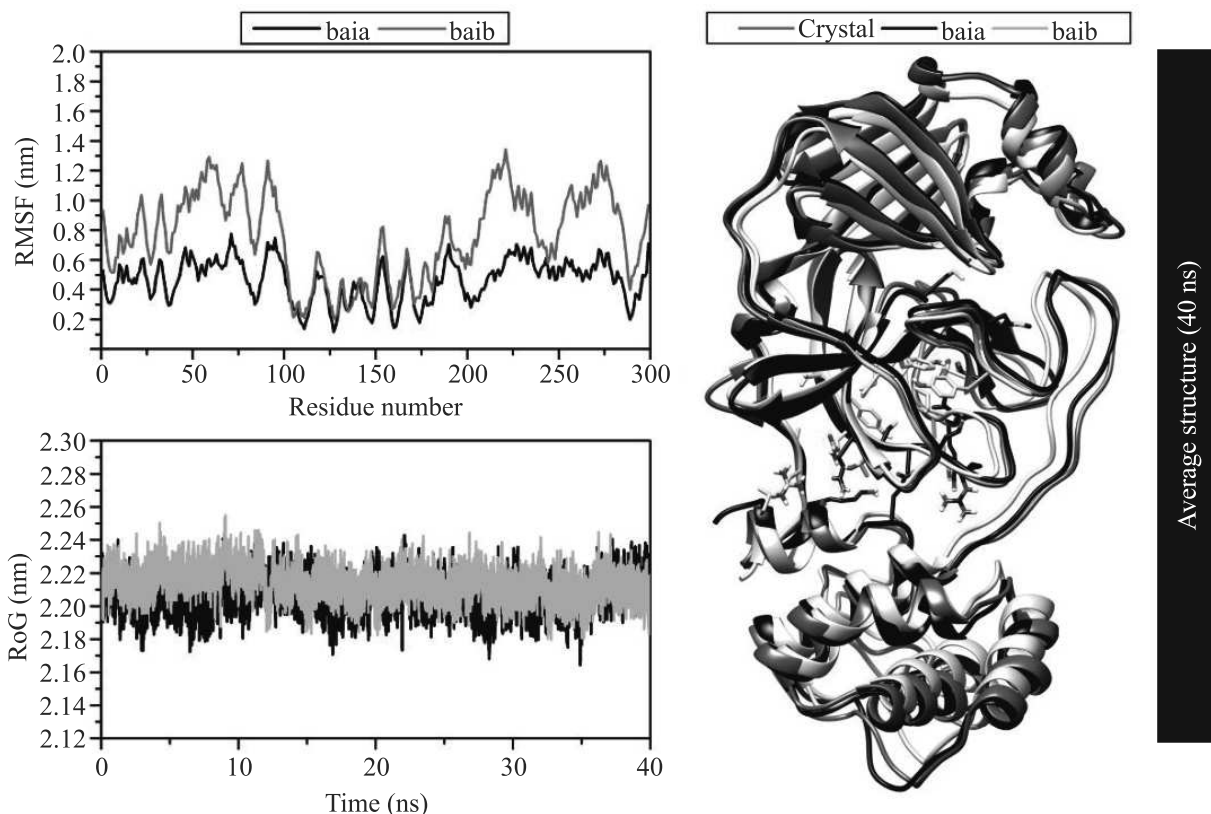


Рис. 5. Среднеквадратичное значение флуктуации и радиуса инерции, построенные по траекториям длительностью 40 нс. Показана суперпозиция средней структурой каждой системы: начальная координата (кристалл) и после моделирования в течение 40 нс (baia и baib)

рактически. Это предположение подтверждается относительно близким средним значением RMSD комплекса baia:  $0.24 \pm 0.02$  нм и baib:  $0.27 \pm 0.02$  нм.

В целом результаты RMSF показали, что мишень лиганда достаточно стабильна, а конформация имеет низкую гибкость. Анализ гибкости системы направлен на то, чтобы увидеть гибкость структуры белка во время моделирования [43]. Эта переменная может быть рассчитана по среднеквадратичной флуктуации (RMSF) (рис. 5). Результаты показывают, что гибкость структуры белка для системы baib больше, чем для системы baia, это видно по среднему значению RMSF каждой системы (табл. 1). Эти результаты показывают, что система baia имеет более жесткую структуру, чем baib, потому что она имеет низкие колебания. В частности, колебания происходили в областях петель (216–221) и  $\alpha$ -спирали (256–276). При этом остатки в активном центре (радиус  $5 \text{ \AA}$  от координаты ингибитора) не флуктуируют чрезмерно. Это указывает на то, что область имеет хорошее взаимодействие между ингибитором-аминокислотами и аминокислотами-аминокислотами. Кроме того, результаты показыва-

ют, что каждая система имеет относительно компактную структуру с незначительными флуктуациями ( $\sim 2.21$  нм) путем расчета радиуса инерции (RoG) (рис. 5). Эти результаты показывают, что в течение времени моделирования 40 нс каждая система имеет хорошо складчатую структуру [44]. Это подтверждается средней структурой за время моделирования 40 нс (рис. 5). Результаты показывают, что обе системы имеют компактные структуры с течением времени по сравнению с кристаллическими структурами. Конформационная динамика каждой системы показывает хорошие требования в процессе моделирования, что становится решающим параметром при оценке других переменных, таких, как свободная энергия связи и водородная связь, которые будут обсуждаться в следующем пункте.

**3.6.2. Анализ водородных связей.** Водородная связь (H-связь) играет решающую роль во взаимодействиях ингибитор-белок [45–47]. Анализ H-связи был рассчитан для траекторий 40 нс во время моделирования для каждой системы (табл. 2). Анализ занятости H-связи играет важную роль в оценке взаимодействий ингибитор-белок. Результаты показыва-

**Таблица 1.** Средние значения траекторного анализа за время моделирования

Параметры	baia	baib
Общая энергия (ккал/моль)	$-89186.80 \pm 200.51$	$-89076.20 \pm 201.11$
RMSD-комплекс (нм)	$0.24 \pm 0.02$	$0.27 \pm 0.02$
RMSD-магистраль (нм)	$0.16 \pm 0.03$	$0.15 \pm 0.02$
RMSD-лиганд (нм)	$0.20 \pm 0.03$	$0.29 \pm 0.07$
СКО (нм)	$0.46 \pm 0.13$	$0.76 \pm 0.28$
RoG (нм)	$2.20 \pm 0.01$	$2.21 \pm 0.00$

**Таблица 2.** Анализ водородных связей с использованием траекторий 40 нс (значение отсечки: расстояние  $< 3.5 \text{ \AA}$  и угол  $> 120^\circ$ )

Контакт	Рамки	Доля (%)	Среднее расстояние	Среднее значение
baia				
O...H-N(Цис144)	3266	16.33	3.15	153.82
(Хис40)O...H-O1	1768	8.84	3.11	154.68
O...H-N(Гли142)	1716	8.58	3.13	135.32
O...H-N2(Гли182)	1152	5.76	3.10	146.29
baib				
(Лиз4)...H-O4	1381	6.905	3.16	142.6

ют, что система baia имеет четыре водородные связи, а система baib имеет только одну водородную связь, зарегистрированную во время моделирования. К сожалению, категория Н-связей является слабой категорией, поскольку она имеет очень малую заселенность Н-связями, на что указывает процентная доля фракции  $< 70\%$  [42]. Это связано с тем, что во время моделирования Н-связь была записана с самым высоким представлением занятости только в маловливающей системе (доля: 16.33%), наблюдаемой в 3266 кадрах из 20000 полных кадров. Однако анализ Н-связей дает довольно четкую картину при взгляде на тип взаимодействия между ингибиторами и белками.

**3.6.3. Прогноз связывающего средства.** Определение связывающего средства каждого ингибитора с белком-мишенью рассчитывали на основе 4000 кадров, извлеченных из 40 нс траекторий. В процессе расчета связывающего средства использовался подход ММ-GBSA [48, 49]. Процесс расчета был выполнен для газовой фазы и при сольватации с учетом нескольких энергетических компонентов (табл. 3). Процесс расчета каждого компонента энергии основан на расчете вкладов энергии в свободную энергию связывания ( $\Delta G_{\text{bind}}$ ) [50]. Компонент энергии в газовой фазе ( $\Delta G_{\text{Gas}}$ ) показывает, что энергия Ван-дер-Ваальса ( $E_{\text{vdW}}$ ) имеет хороший вклад по сравнению с электростатической энергией ( $E_{\text{elec}}$ ). Кроме того, вклад энергии в фазе растворителя ( $\Delta G_{\text{sol}}$ ) показывает неблагоприятный вклад в полярную энергию ( $\Delta G_{\text{sol}}^{\text{ele}}$ ) для обобщенной модели Борна. Однако в целом  $\Delta G_{\text{bind}}$  каждого комплекса показала хо-

**Таблица 3.** Определение энергетической составляющей (ккал/моль) каждого комплекса с использованием метода ММ-GBSA. Данные представлены как среднее  $\pm$  стандартная ошибка среднего (SEM)

Энергетическая составляющая	baia	baib
Газовый термин		
$E_{\text{vdW}}$	$-28.84 \pm 0.06$	$-27.83 \pm 0.08$
$E_{\text{elec}}$	$-4.50 \pm 0.05$	$0.00 \pm 0.00$
$\Delta G_{\text{gas}}$	$-33.34 \pm 0.09$	$-27.83 \pm 0.08$
Срок решения		
$\Delta G_{\text{sol}}^{\text{ele}}$	$12.03 \pm 0.05$	$7.41 \pm 0.02$
$\Delta G_{\text{sol}}^{\text{nonpolar}}$	$-3.90 \pm 0.00$	$-3.73 \pm 0.01$
$\Delta G_{\text{sol}}$	$8.13 \pm 0.04$	$3.68 \pm 0.01$
Связывание свободной энергии		
$\Delta G_{\text{bind}}(\text{GBSA})$	$-25.21 \pm 0.06$	$-24.15 \pm 0.07$

рошее взаимодействие. На это указывает более высокое отрицательное значение с точки зрения термодинамики. Есть надежда, что ингибиторы с хорошим средством связывания (более низкое отрицательное значение) могут прочно связываться с активным центром белка. Каждый ингибитор, который связывается с двумя разными активными центрами, показывает относительно схожую величину (разница:  $\sim 1.06$  ккал/моль). Эти результаты дают достаточно четкое представление о способности ингибитора связываться с белком-мишенью.

**3.7. Интегрирование по атомным бассейнам комплексов ингибитор-белок.** Интегрирование по атомным бассейнам комплексов ингибитор-белок проводилось с использованием квантово-

**Таблица 4.** Интегральные характеристики ( $S$ ,  $V$ ,  $Q$ ,  $N_{\text{neigh}}$ ,  $N_{\text{on-neigh}}$ ) лигандов в газовой фазе и в комплексе “рецептор-лиганд”, а также их разности ( $\Delta$ )

Лиганды	Параметры	Лиганд в газовой фазе	Лиганд в комплексе фермент-лиганд	$\Delta$
baia	$S, \text{\AA}^2$	319.12	160.30	-158.82
	$V, \text{\AA}^3$	360.37	352.34	-8.03
	$N_{\text{neigh}}, e$	19.95987	20.34643	0.396555
	$N_{\text{on-neigh}}, e$	19.94987	20.34734	0.397471
	$Q, e$	0	0.00092	0.00092
baib	$S, \text{\AA}^2$	476.83	266.03	-210.80
	$V, \text{\AA}^3$	567.59	550.17	-17.42
	$N_{\text{neigh}}, e$	32.57773	33.17946	0.601736
	$N_{\text{on-neigh}}, e$	32.57773	33.17544	0.597713
	$Q, e$	0	-0.00401	-0.00401

химического свободно-орбитального подхода AlteQ. Недавно было показано, что этот метод описывает трехмерные карты электронной плотности, полученные для органических и неорганических соединений с использованием данных низкотемпературной рентгеновской дифракции высокого разрешения с очень хорошим качеством, превосходящим другие широко известные квантово-химические методы [51, 52]. Затем были рассчитаны различные интегральные молекулярные и атомные характеристики с использованием трехмерных карт AlteQ и квантовой теории атомов в молекулах, или QТАИМ, предложенной Бейдером [53]. Мы использовали программу “Расчет электронных свойств: интегрирование по атомным бассейнам”, доступную на сайте [www.chemosophia.com](http://www.chemosophia.com). Применялось радиальное интегрирование по атомным бассейнам, начиная с атомного центра и заканчивая достижением поверхности электронной плотности 0.001 а.е. или когда электронная плотность равна электронной плотности соседнего атома. Более подробно этот метод описан в [54]. Наиболее важные полученные интегральные характеристики (площадь, доступная для молекулярного растворителя ( $S$ ), объем ( $V$ ), заряд ( $Q$ ), количество электронов, которые атомы оттягивают от своих соседей ( $N_{\text{neigh}}$ ), количество электронов, которые атомы передают соседям ( $N_{\text{on-neigh}}$ ) для лигандов в газовой фазе и в комплексе “рецептор-лиганд”, а также их разности ( $\Delta$ ) приведены в табл. 4.

Интегральные характеристики показывают, что baia незначительно передает электроны ферменту в процессе их взаимодействия ( $Q > 0$ ), а baib незначительно принимает электроны от фермента ( $Q < 0$ ). При этом взаимодействия baib с ферментом более эффективны, что проявляется в более значительных перекрытиях электронных облаков baib с ферментом: при неизменной величине ковалентных пере-

крываний значительно усиливаются межмолекулярные перекрытия, что отражается в серьезном увеличении числа электронов  $N_{\text{neigh}}$  и  $N_{\text{on-neigh}}$ , а также серьезном уменьшении объема и площади поверхности.

В обоих случаях образуются взаимодействия как с переносом электронной плотности от лиганда к ферменту, так и наоборот. Атомные бассейны лигандов в комплексах с ферментом показаны на рис. 6. Действительно, бассейны как атомов кислорода, так и атомов водорода лиганда усечены. Атомы фермента, контактирующие с ними, схематично показаны на рис. 6.

**4. Вывод.** Альтернативной стратегией, которая позволяет быстро определить потенциальные терапевтические возможности для лечения быстро развивающихся вирусных инфекций, является репрофилирование уже получивших одобрение фармацевтических продуктов, в том числе перспективных лекарств. ВЗМО и НСМО-орбитали и MEP, исследованные с помощью DFT, открыли межмолекулярные взаимодействия посредством переноса заряда внутри молекулы. Согласно исследованиям DFT, соединения baia и baib являются перспективными для создания лекарств, которые являются селективными, безопасными и эффективными против COVID-19. Исследования интегральных характеристик методом AlteQ показали, что в baia и baib образуются взаимодействия с переносом электронной плотности от лиганда к ферменту, и наоборот. В целом, наши результаты показывают, что baia и baib, обладающие хорошим сродством к связыванию, являются компонентами Datura metel L, что предполагает биологически безопасный профиль этих соединений, что еще больше подтверждает потенциал этих соединений в качестве отправной точки для терапии против COVID-19. Наши исследования были проведены для выявления биоактивных соединений, которые могут

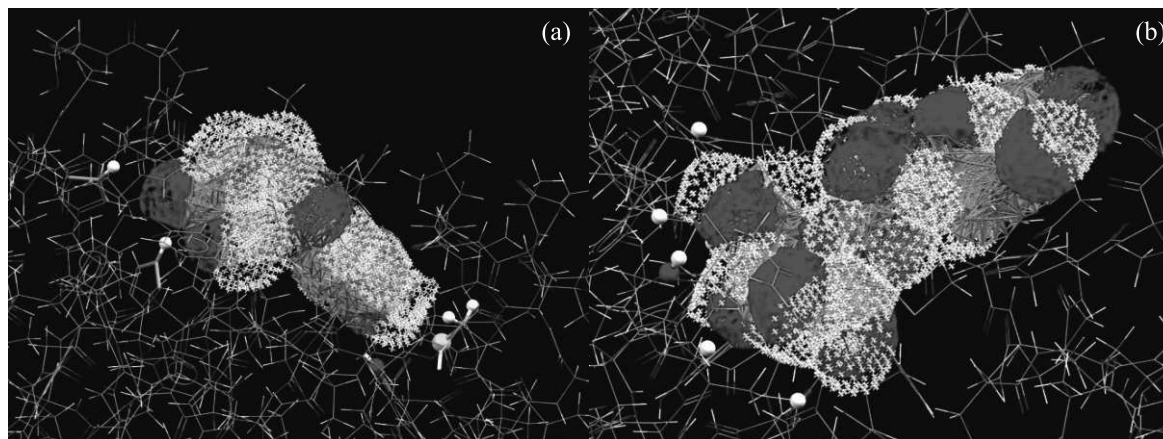


Рис. 6. (Цветной онлайн) Атомные бассейны лигандов в комплексах с ферментом: (а) – baia; (б) – baib

эффективно ингибировать M<sup>pro</sup> COVID-19, а также для получения полезной информации для будущих исследований. Тем не менее, необходимо провести дальнейшие исследования для проверки этих соединений с использованием моделей *in vitro* и *in vivo*, чтобы проложить путь для этих соединений к их использованию в качестве лекарств.

Работа д-ра К. Гурушанкара и д-ра М. Гришиной выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, Департамента науки и технологий (Индия) и Национального совета по научно-техническому развитию (Бразилия), номер проекта 20-53-80002.

1. S. Voopathi, A. B. Poma, and P. Kolandaivel, *J. Biomol. Struct. Dyn.* **39**, 3409 (2021).
2. K. Dhama, K. Sharun, R. Tiwari, M. Dadar, Y. S. Malik, K. P. Singh, and W. Chaicumpa, *Hum. Vaccin. Immunother.* **16**, 1232 (2020).
3. M. Cascella, M. Rajnik, A. Aleem, S. C. Dulebohn, and R. D. Napoli, 2022 Oct. 13. in: *StatPearls* [Internet]. Treasure Island (FL): StatPearls Publishing (2022).
4. S. Beyersted, E. B. Casaro, and E. B. Range, *Eur. J. Clin. Microbiol. Infect. Dis.* **40**, 905 (2021).
5. R. Razali, H. Asis, and C. Budiman, *Microorganisms* **9**, 2481 (2021).
6. S. G. Katre, A. J. Asnani, K. Pratyush, N. G. Sakharkar, A. G. Bhope, K. T. Sawarkar, and V. S. Nimbekar, *Futur. J. Pharm. Sci.* **8**, 36 (2022).
7. C. Liu, Q. Zhou, Y. Li, L. V. Garner, S. P. Watkins, L. J. Carter, J. Smoot, A. C. Gregg, A. D. Daniels, S. Jervej, and D. Albaiu, *ACS Cent. Sci.* **25**, 315 (2020).
8. Z. Xu, C. Peng, Y. Shi, Z. Zhu, K. Mu, and X. Wang, <https://doi.org/10.1101/2020.01.27.921627> (2020).
9. N. Bohr, *Dialectica* **2**, 312 (1948).
10. H. Rimac, M. A. Grishina, and V. A. Potemkin, *Future Med. Chem.* **12**, 1387 (2020).
11. S. Kandagalla, H. Rimac, V. A. Potemkin, and M. A. Grishina, *Future Med. Chem.* **13**, 863 (2021).
12. H. Rimac, M. Grishina, and V. Potemkin, *J. Chem. Inf. Model* **61**, 1801 (2021).
13. N. Palko, M. Grishina, and V. Potemkin, *Molecules* **26**, 3960 (2021).
14. M. Akram, I. M. Tahir, S. M. A. Shah, Z. Mahmood, A. Altaf, K. Ahmad, N. Munir, M. Daniyal, S. Nasir, and H. Mehboob, *Phytother. Res.* **32**, 811 (2018).
15. Y. Zhao, Y. Wu, and M. Wang, in: *Handbook of Food Chemistry*, ed. by P. Cheung and B. Mehta, Springer, Berlin, Heidelberg (2015).
16. V. Kumar, V. Bhatt, and N. Kumar, *Studies in Natural Products Chemistry* **56**, 287 (2018).
17. Y. Xiao, Y. Yan, L. Chang, H. Ji, H. Sun, S. Song, K. Feng, A. Nuermaimaiti, Z. Lu, and L. Wang, *Antiviral Res.* **212**, 105558 (2023).
18. K. Gurushankar, H. Rimac, V. Potemkin, and M. Grishina, *J. Mol. Struct.* **1230**, 129925 (2021).
19. B. R. Beck, B. Shin, Y. Choi, S. Park, and K. Kang, *Comput. Struct. Biotechnol. J.* **18**, 784 (2020).
20. A. A. Elfiky, *Life Sci.* **253**, 117592e (2020).
21. A. Belhassan, S. Chtita, H. Zaki, T. Lakhlifi, and M. Bouachrine, *Bioinformation* **16**, 404 (2020).
22. N. Muralidharan, R. Sakthivel, D. Velmurugan, and M. M. Gromiha, *J. Biomol. Struct. Dyn.* **39**, 2673 (2021).
23. S. Vardhan and S. K. Sahoo, *Comput. Biol. Med.* **124**, 103936 (2020).
24. P. Calligari, S. Bobone, G. Ricci, and A. Bocedi, *Viruses* **12**, 445 (2020).
25. L. S. Braga, D. H. Leal, K. Kuca, and T. C. Ramalho, *Curr. Org. Chem.* **24**, 314 (2020).

26. R. Sahu, R.K. Mohapatra, S.I. Al-Resayes, D. Das, P.K. Parhi, S. Rahman, L. Pintilie, M. Kumar, M. Azam, and A. Ansari, *J. Saudi Chem. Soc.* **25**, 101193 (2021).
27. F. Pereira, K. Xiao, D.A. Latino, C. Wu, Q. Zhang, and J. Aires-de-Sousa, *J. Chem. Inf. Model* **57**, 11 (2017).
28. A. Karupphasamy, K.G. Krishnan, M.P. Velayutham Pillai, and C. Ramalingan, *J. Mol. Struct.* **1128**, 674 (2017).
29. N. Rasool, F. Yasmin, S. Sahai, W. Hussain, H. Inam, and A. Arshad, *Chem. Phys. Lett.* **771**, 138463 (2021).
30. M.G. Khrenova, V.G. Tsirelson, and A.V. Nemukhin, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **22**, 19069 (2020).
31. K. Arafet, N. Serrano-Aparicio, A. Lodola, A.J. Mulholland, F.V. González, K. Świderek, and V. Moliner, *Chem. Sci.* **12**, 1433 (2021).
32. C.M. Coleman, J.M. Sisk, R.M. Mingo, E.A. Nelson, J.M. White, and M.B. Frieman, *J. Virol.* **90**, 8924 (2016).
33. R. Dennington, T. Keith, and J. Milam, *Shawnee Mission KS*, 2009. Version 5.
34. N.M. O'Boyle, A.L. Tenderholt, and K.M. Langner, *J. Compt. Chem.* **29**, 839 (2008).
35. K. Gholivand, F. Mohammadpanah, M. Pooyan, and R. Roohzadeh, *Journal of Molecular Structure* **1248**, 131481 (2022).
36. H.S. Sumrra, A.U. Hassan, M. Imran, M. Khalid, E.U. Mughal, M.N. Zafar, M.N. Tahir, M.A. Raza, and A.A.C. Braga, *Appl. Organomet. Chem.* **34**, e5623 (2020).
37. A. Ali, M. Khalid, S. Abid, J. Iqbal, M.N. Tahir, A.R. Raza, J. Zukerman-Schpector, and M.W. Paixao, *Appl. Organomet. Chem.* **34**, e5399 (2020).
38. Y.S. Mary, G. Yalcin, Y.S. Mary, K.S. Resmi, R. Thomas, T. Önkol, E.N. Kasap, and I. Yildiz, *Chemical Papers* **74**, 1957 (2020).
39. S. Christopher Jeyaseelan and A. Milton Franklin Benial, *J. Mol. Recognit.* **34**, e2872 (2021).
40. M. Pradeep Kumar, K. Kranthi Raj, D. Ramachandran, M.N.S. Pavan Kumar, Radha Vaddavalli, and P. Jhansi Lakshmi, *J. Proteomics Bioinform.* **3**, 305 (2010).
41. A. Kumari, V.S. Rajput, P. Nagpal, H. Kukrety, S. Grover, and A. Grover, *J. Biomol. Struct. Dyn.* **40**, 4987 (2022).
42. B. Nutho, S. Pengthaisong, A. Tankrathok, V.S. Lee, J.R.K. Cairns, T. Rungrotmongkol, and S. Hannongbua, *Biomolecules* **10**, 1 (2020).
43. A. Bornot, C. Etchebest, and A.G. De Brevern, *Proteins Struct. Funct. Bioinforma.* **79**, 839 (2011).
44. T. Joshi, T. Joshi, P. Sharma, S. Chandra, and V. Pande, *J. Biomol. Struct. Dyn.* **39**, 823 (2021).
45. B. Nutho, P. Mahalapbutr, K. Hengphasatporn, N.C. Pattarangoon, N. Simanon, Y. Shigeta, S. Hannongbua, and T. Rungrotmongkol, *Biochemistry* **59**, 1769 (2020).
46. R. Suno, S. Lee, S. Maeda, S. Yasuda, K. Yamashita, K. Hirata, S. Horita, M.S. Tawaramoto, H. Tsujimoto, T. Murata, M. Kinoshita, M. Yamamoto, B.K. Kobilka, N. Vaidehi, S. Iwata, and T. Kobayashi, *Nat. Chem. Biol.* **14**, 1150 (2018).
47. P. Mahalapbutr, N. Darai, W. Panman, A. Opasmahakul, N. Kungwan, S. Hannongbua, and T. Rungrotmongkol, *Sci. Rep.* **9**, 1 (2019).
48. B.R. Miller, T.D. McGee, J.M. Swails, N. Homeyer, H. Gohlke, and A.E. Roitberg, *J. Chem. Theory Comput.* **8**, 3314 (2012).
49. C. Wang, D. Greene, L. Xiao, R. Qi, and R. Luo, *Front. Mol. Biosci.* **4**, 1 (2018).
50. U. Ryde and P. Soderhjelm, *Chem. Rev.* **116**, 5520 (2016).
51. V.A. Potemkin and M.A. Grishina, *J. Comput. Aided Mol. Des.* **22**, 489 (2008).
52. M. Grishina, O. Bolshakov, A. Potemkin, and V. Potemkin, *Comput. Theor. Chem.* **1091**, 122 (2016).
53. R.F.W. Bader, *Chem. Rev.* **91**, 893 (1991).
54. V. Naumovich, M. Grishina, J. Novak, P. Pathak, V. Potemkin, M. Shahbaaz, and M.H. Abdellattif, *J. Biomol. Struct. Dyn.* **40**, 4775 (2022).

# Emergent long-lived Zitterbewegung in Su–Schrieffer–Heeger lattice with third-nearest-neighbor hopping

M.-N. Chen<sup>+</sup>, X.-J. Yu<sup>\*</sup>, Z. Li<sup>+×◦1)</sup>

<sup>+</sup>Guangdong Provincial Key Laboratory of Quantum Engineering and Quantum Materials, SPTE, South China Normal University, 510006 Guangzhou, China

<sup>\*</sup>International Center for Quantum Materials, School of Physics, Peking University, 100871 Beijing, China

<sup>×</sup>Guangdong-Hong Kong Joint Laboratory of Quantum Matter, Frontier Research Institute for Physics, South China Normal University, 510006 Guangzhou, China

<sup>◦</sup>Guangdong Provincial Key Laboratory of Nuclear Science, Institute of Quantum Matter, South China Normal University, 510006 Guangzhou, China

Submitted 17 February 2023

Resubmitted 14 April 2023

Accepted 14 April 2023

DOI: 10.31857/S1234567823100129, EDN: cofefc

With the Dirac equation as its core, relativistic quantum mechanics predicts that particles show a high-frequency Zitterbewegung (ZB) even in free motion [1, 2]. For a free electron, the Dirac equation predicts the ZB is so high in frequency ( $\omega_{ZB} \sim 10^{21}$  Hz) and so small in amplitude ( $A_{ZB} \sim 10^{-12}$  m) that it is impossible to observe it directly with current experimental techniques [3]. Though early studies on ZB were mainly focused on electrons, current research has proved that ZB phenomenon is actually not unique to electrons, but widely exists in condensed matter systems with linear dispersion such as graphene [4], Weyl semi-metal [5], topological insulator [6] and other systems [7]. A valid Dirac equation is shared by all these systems to describe the dynamical properties. With the progress of quantum simulation technology, the simulation of ZB has been realized on various quantum simulation platforms, such as phononic/photonic crystals [8], trapped ions [9], ultracold atoms [10].

Furthermore, J. A. Lock predicted in 1979 that the finite-sized initial wavepacket will lead to the damping of ZB, i.e., the corresponding amplitude will decay very fast over time [11]. His prediction has been verified by theories [12] and experiments [9] in succession. The fleeting existence of ZB makes it difficult to observe in experiments. Besides, recent studies have found that the introduction of the third-nearest-neighbor (N3) hopping can change the energy band structure, leading to Dirac point metamorphosis [13], a growing number of research concern relative systems with N3 hop-

ping. It is natural to ask whether a quasi-flat band structure can be produced by Dirac point metamorphosis, thereby reducing the diffusion rate of the quasiparticles and ultimately producing the long-lived ZB phenomenon? To answer this question, we propose a N3 Su–Schrieffer–Heeger (SSH) model which features not only the nearest-neighbor hopping, but also the N3 hopping.

As for cold atomic lattice system, the standard SSH can be implemented by loading rubidium atoms [14]. By introducing the auxiliary laser, one can effectively control the N3 hopping. The low-energy effective Hamiltonian of the system can be obtained as

$$H_{\text{eff}} = v_x q_x \sigma_x + \left( \Delta + \frac{q_x^2}{2m^*} \right) \sigma_z, \quad (1)$$

where  $v_x$  denotes the effective light velocity in  $x$  direction.  $\Delta$  is the gap parameter and  $m^*$  is the effective mass. The corresponding dynamical properties of quasiparticles in a N3 SSH lattice can be described by the following equation of motion, i.e.,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H_{\text{eff}} \Psi. \quad (2)$$

In order to study the wavepacket dynamics of quasiparticles in the N3 SSH lattice, we directly solve the equation of motion Eq. (2) with Hamiltonian Eq. (1). Throughout the calculation, a universal Gaussian wavepacket without initial velocity is considered as the initial state, i.e.,

$$|\Psi(x)\rangle = G(x)|\Phi\rangle. \quad (3)$$

<sup>1)</sup>e-mail: lizphys@m.scnu.edu.cn

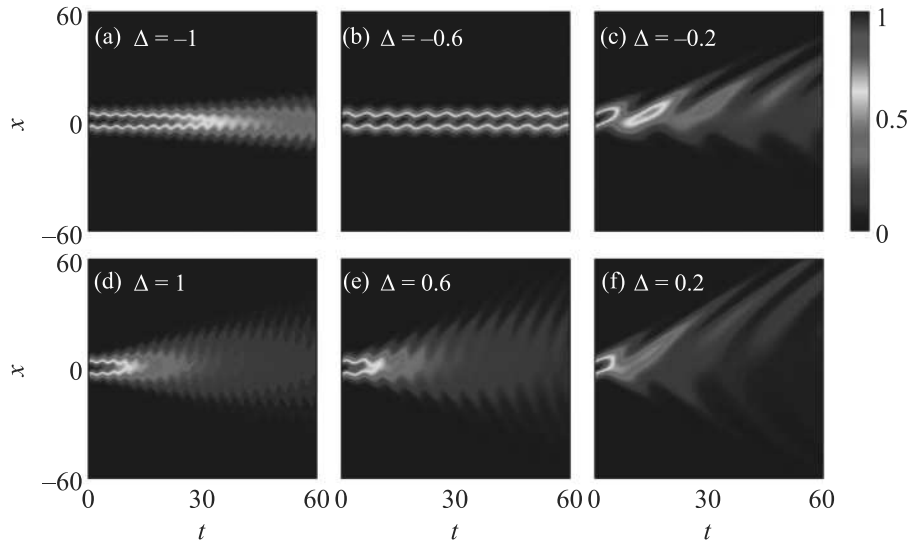


Fig. 1. (Color online) Numerically calculated probability distributions,  $|\Psi(x,t)|^2$ , for  $\Delta = -1, -0.6, -0.2, 1, 0.6, 0.2$  (from panels (a) to (f)). Throughout the calculation, the width of the initial wavepacket  $L = 5$ , effective light velocity in  $x$  direction  $v_x = 1$  and the effective mass  $m^* = 0.5$

Visualized evolution of wavepacket is plotted in Fig. 1a–f. As shown in the Fig. 1, the centroid of the wavepacket exhibits periodic oscillations whenever  $\Delta \neq 0$ , which is the evidence of ZB effect. To be specific, when  $\Delta < 0$  (see Fig. 1a–c), the attenuation of ZB effect decreases first and then increases with the decreasing  $\Delta$ . Notably, one can see a stable ZB effect when  $\Delta = -0.6$  (see Fig. 1b), where the width (amplitude) of wavepacket barely expands (decreases). On the other hand, when  $\Delta > 0$ , no matter how the parameter  $\Delta$  changes, the attenuation of ZB effect is still very strong and its life-span is very short. Then, in order to further grasp the physical mechanism behind the long-lived ZB phenomenon, the long-time average inverse participation rate and momentum distribution of the system are calculated, and the corresponding energy band structure of the system is discussed. The results of the theoretical analysis show that the N3 SSH model has a unique advantage over the standard SSH model, i.e., the introduction of the N3 hopping can effectively modulate the energy band structure near the high symmetry point to the quasi-flat band, thus restraining the diffusion of the quasiparticle wave packets, which in turn prolongs the interference time of the positive and negative branches, and finally leads to the long-lived ZB phenomenon of the system. Furthermore, we propose an experimental scheme in cold atomic system. Due to its easy accessibility and high controllability, we hope the long-lived ZB effect predicted here can be verified experimentally in the near future.

This is an excerpt of the article “Emergent long-lived Zitterbewegung in Su–Schrieffer–Heeger lattice with third-nearest-neighbor hopping”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364023600386

1. P. A. M. Dirac, Proc. R. Soc. Lond. A **117**, 610 (1928).
2. E. Schrödinger, Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss. Phys. Math. Kl. **24**, 418 (1930).
3. D. Hestenes, Front. Phys. **20**, 10 (1990).
4. T. M. Rusin and W. Zawadzki, Phys. Rev. **76**, 195439 (2007).
5. T. Huang, T. Ma, and L.-G. Wang, J. Phys. Condens. Matter **30**, 245501 (2018).
6. L.-K. Shi, S.-C. Zhang, and K. Chang, Phys. Rev. B **87**, 161115(R) (2013).
7. W. Zawadzki and T. M. Rusin, J. Phys. Condens. Matter **23**, 143201 (2011).
8. X.-D. Zhang, Phys. Rev. Lett. **100**, 113903 (2008).
9. R. Gerritsma, G. Kirchmair, F. Zähringer, E. Solano, R. Blatt, and C. F. Roos, Nature **463**, 68 (2010).
10. J. Y. Vaishnav and C. W. Clark, Phys. Rev. Lett. **100**, 153002 (2008).
11. J. A. Lock, Am. J. Phys. **47**, 797 (1979).
12. H. Hilhorst, M. J. Washenberger, and U. C. Täuber, J. Stat. Mech. Theory Exp. **2004**, P10002 (2004).
13. C. Bena and L. Simon, Phys. Rev. B **83**, 115404 (2011).
14. E. J. Meier, F. A. An, and B. Gadway, Nat. Commun. **7**, 13986 (2016).



# Содержание

## Том 117, выпуск 9

### Поля, частицы, ядра

Бритвич Г.И., Костин М.Ю., Питалев В.И., Полуэктов И.В., Сандомирский Ю.Е., Чесноков М.Ю., Чесноков Ю.А., Янович А.А. Формирование пучка частиц высокой энергии с помощью фокусирующих кристаллических устройств ..... 639

Брагута В.В., Кудров И.Е., Роечко А.А., Сычев Д.А., Чернодуб М.Н. Изучение уравнения состояния вращающейся глюонной плазмы с помощью решеточного моделирования ..... 644

Глушков А.В., Сабуров А.В., Ксенофонтов Л.Т., Лебедев К.Г. Загадка мюонов в ШАЛ сверхвысоких энергий по данным Якутской установки и эксперимента Ожэ ..... 651

### Оптика, лазерная физика

Хайрулин И.Р., Антонов В.А., Рябикин М.Ю. О возможности преобразования с увеличением энергии линейно поляризованных аттосекундных импульсов высоких гармоник в циркулярно поляризованные в оптически модулированной неоподобной активной среде плазменного рентгеновского лазера ..... 658

Газизов А.Р., Салахов М.Х., Харинцев С.С. Оптомеханические эффекты нагрева и охлаждения при гигантском комбинационном рассеянии света в среде с близкой к нулю диэлектрической проницаемостью ..... 670

### Конденсированное состояние

Гришаков К.С., Дегтяренко Н.Н. Устойчивость твердых атомарных фаз азота при нормальном давлении ..... 676

Тимофеев В.Е., Аристов Д.Н. Динамическая восприимчивость скирмионного кристалла ..... 684

Хисамеева А.Р., Щепетильников А.В., Дремин А.А., Кукушкин И.В. Исследование спин-орбитального взаимодействия в гетеропереходах  $ZnO/Mg_xZn_{1-x}O$  посредством спектроскопии спинового резонанса ..... 689

Behera D., Mukherjee S.K. Insight to structural, electronic, optical and thermoelectric properties of NaCaSb and KCaSb half Heusler compounds: a DFT approach ..... 695

Бабунц Р.А., Батуева А.В., Гурин А.С., Лихачев К.В., Единач Е.В., Баранов П.Г. Обнаружение спектров ЭПР оптически индуцированных носителей со свойствами эффективной массы в диалъкогениде переходного металла  $WS_2$  ..... 697

Орлов Ю.С., Николаев С.В., Овчинников С.Г. Экситонное упорядочение в сильно коррелированных системах со спиновым кроссовером ..... 704

**Методы теоретической физики**

<b>Ефимов С.П.</b> Оператор Рунге–Ленца в импульсном пространстве .....	712
---	-----

# Содержание

## Том 117, выпуск 10

### Поля, частицы, ядра

Хайдуков З.В. Эффект разделения киральностей в кварк-глюонной плазме ..... 719

### Оптика, лазерная физика

Бабенко П.Ю., Михайлов В.С., Зиновьев А.Н. Потенциал взаимодействия протонов и атомов водорода с металлами ..... 723

Минин О.В., Джоу С., Баранов П.Ф., Минин И.В. Дифракционно-ограниченная фокусировка звуковых волн мезоразмерной плоской Янус-линзой ..... 727

Макаров Г.Н., Петин А.Н. Увеличение эффективности изотопно-селективной лазерной ИК многофотонной диссоциации молекул  $^{11}\text{BCl}_3$  в смеси с сенсibilизатором и акцептором радикалов  $\text{SF}_6$  ..... 734

Чистяков В.А., Сидоренко М.С., Саянский А.Д., Рыбин М.В. Квазикристаллические структуры с узкополосной спектрально-угловой селективностью ..... 740

### Плазма, гидро- и газодинамика

Огородников В.А., Ерунов С.В., Панов К.Н., Чудаков Е.А., Блинов И.А., Георгиевская А.Б., Замыслов Д.Н., Фарин И.Р. Характеристики “пылевых” потоков с поверхности лайнеров из меди и свинца при выходе на нее одной или последовательно двух ударных волн ..... 746

### Конденсированное состояние

Каган М.Ю., Аксенов С.В., Турлапов А.В., Ихсанов Р.Ш., Кугель К.И., Мазур Е.А., Кузнецов Е.А., Силкин В.М., Буровский Е.А. Образование капель параметра порядка и сверхпроводимость в неоднородных Ферми–Бозе смесях (Миниобзор) ..... 754

Петров Д.А., Эдельман И.С., Тхакур А., Тхакур П., Сухачев А.Л., Овчинников С.Г. Связь между магнитными и электрическими свойствами в серии наночастиц  $\text{Co}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Fe}_2\text{O}_4$  ..... 765

Снегирёв Н.И., Чуев М.А., Любутин И.С., Старчиков С.С., Ягупов С.В., Стругацкий М.Б. Влияние магнитной доменной структуры на поляризационные эффекты в мессбауэровских спектрах монокристаллов бората железа  $\text{FeBO}_3$  ..... 770

Алисултанов З.З., Демиров Н.А. Наклон и анизотропия дираковского спектра, вызванные перекрытием блоховских функций ..... 777

### Биофизика

Гурушанкар К., Джеясилан С.К., Гришина М., Сисванто И., Тивар Р., Пуспанингсик Н.Н.Т. Теория функционала плотности, молекулярная динамика и AlteQ для исследования баймантуолоуоамида А и баймантуолоуоамида В и выявления потенциальных ингибиторов белков  $\text{M}^{\text{Pro}}$  – новой мишени для лечения SARS COVID-19 ..... 783

## Разное

<b>Chen M.-N., Yu X.-J., Li Z.</b> Emergent long-lived Zitterbewegung in Su–Schrieffer–Heeger lattice with third-nearest-neighbor hopping .....	794
---	-----

