

ISSN 0044-4510

Том 164, Выпуск 5

Ноябрь 2023



ЖУРНАЛ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ и ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

www.sciencejournals.ru



РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ОСНОВАН В МАРТЕ 1873 ГОДА

ТОМ 164, ВЫПУСК 5 (11)

ВЫХОДИТ 12 РАЗ В ГОД

НОЯБРЬ 2023

МОСКВА

РАН

ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ ПОД РУКОВОДСТВОМ ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК РАН

СОДЕРЖАНИЕ

АТОМЫ, МОЛЕКУЛЫ, ОПТИКА

- Влияние нагрева на генерацию и свойства платиконов в высокочастотных оптических микрорезонаторах Лобанов В. Е. 701
- Активное броуновское движение пылевых частиц в квазиодномерных (цепочечных) структурах в тлеющем разряде
.. Светлов А. С., Кононов Е. А., Трухачёв Ф. М., Васильев М. М., Петров О. Ф. 715
- Формирование фантомных изображений в волоконно-оптическом эндоскопе на основе рассеяния света
Агапов Д. П., Беловолов И. В., Магницкий С. А., Фроловцев Д. Н., Чиркин А. С. 722

ЯДРА, ЧАСТИЦЫ, ПОЛЯ, ГРАВИТАЦИЯ И АСТРОФИЗИКА

- Характеристики протон-протонных столкновений, смоделированных с помощью Монте-Карло генераторов, при энергиях NICA Азаркин М. Ю., Киракосян М. Р. 731

ТВЕРДЫЕ ТЕЛА И ЖИДКОСТИ

- Кинетика роста квантовых кристаллов ^4He при температуре 0.1–0.2 K
..... Гусев Р. Б., Цымбаленко В. Л. 752
- Зеемановское расщепление экситонов в квантовых ямах GaAs/AlGaAs в геометрии Фарадея
..... Григорьев Ф. С., Чукаев М. А., Ловцос В. А., Ефимов Ю. П., Елисеев С. А. 761

ПОРЯДОК, БЕСПОРЯДОК И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ

Спиновые состояния ионов Co и переход металл–полупроводник в слоистых кобальтитах $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ ($\delta = 0.52, 0.74$) Солин Н. И., Наумов С. В., Королев А. В., Галахов В. Р.	770
Исследование влияния эффектов конкуренции различных типов анизотропии на критическое поведение мультислойных магнитных структур Минькова А. В., Прудников В. В., Прудников П. В.	782
Фазовые переходы в часовой модели с числом состояний спина $q = 5$ на треугольной решетке Муртазаев А. К., Бадиев М. К., Магомедов М. А., Рамазанов М. К.	790

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Модель спинового стекла для квантовых ям GaAs/AlGaAs, легированных немагнитными примесями, вблизи перехода металл–изолятор Агринская Н. В., Козуб В. И.	797
Поглощение света в дихалькогенидах переходных металлов в скрещенных полях Магарилл Л. И., Чаплик А. В.	805
Влияние шума на резистивное переключение мемристора на основе стабилизированного диоксида циркония Горшков О. Н., Филатов Д. О., Коряжкина М. Н., Лобанова В. А., Рябова М. А.	810
Переходы Лифшица и угловые диаграммы проводимости в металлах со сложными поверхностями Ферми Мальцев А. Я.	817

СТАТИСТИЧЕСКАЯ И НЕЛИНЕЙНАЯ ФИЗИКА, ФИЗИКА «МЯГКОЙ» МАТЕРИИ

Гидравлический прыжок для прямолинейного и осесимметричного течения слоя жидкости Сухов А. Д., Петров А. Г.	839
Асимптотическая теория солитонов, порождаемых из интенсивного волнового импульса Камчатнов А. М.	847
Оптический аналог вращающегося бинарного бозе-конденсата Рубан В. П.	863

ВЛИЯНИЕ НАГРЕВА НА ГЕНЕРАЦИЮ И СВОЙСТВА ПЛАТИКОНОВ В ВЫСОКОДОБОРНЫХ ОПТИЧЕСКИХ МИКРОРЕЗОНАТОРАХ

*В. Е. Лобанов**

*^a Российский квантовый центр
121205, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 27 апреля 2023 г.,
после переработки 24 мая 2023 г.
Принята к публикации 24 мая 2023 г.

При накачке высокодобротного оптического микрорезонатора внешним лазером неизбежно проявляются тепловые эффекты. Они оказывают существенное влияние на динамику нелинейных процессов в таких структурах, в том числе и на генерацию оптических частотных гребенок и диссипативных солитонов. Процесс генерации и свойства светлых солитонов в таких нагретых микрорезонаторах при аномальной дисперсии групповых скоростей хорошо изучены, и разработан ряд методов, минимизирующих влияние тепловых процессов. Однако для темных солитонов или платиконов, возбуждаемых при нормальной дисперсии групповых скоростей, эти вопросы исследованы существенно меньше. В данной работе проанализированы свойства платиконов в нагретых микрорезонаторах и показано, что в случае «положительных» тепловых эффектов, когда направление теплового сдвига резонансных частот микрорезонатора совпадает с направлением нелинейного сдвига, устойчивы наиболее широкие высокоэнергетичные платиконы, длительность которых близка к времени обхода в резонаторе. В случае «отрицательных» тепловых эффектов устойчивость сохраняют узкие низкоэнергетичные платиконы. Более того, в микрорезонаторах с «отрицательными» тепловыми эффектами взаимодействие кубично-нелинейных и тепловых процессов может обеспечить возможность генерации платиконов без применения специальных приемов, необходимых в иных случаях.

DOI: 10.31857/S0044451023110019
EDN: PMXETW

1. ВВЕДЕНИЕ

Многочисленные исследования, проведенные за последние три десятилетия, убедительно доказали, что благодаря своим уникальным свойствам высокодобротные оптические микрорезонаторы [1–3] являются идеальной платформой для реализации, исследования и применения различных нелинейно-оптических процессов [4–7]. При этом было обнаружено, что на динамику нелинейных процессов в микрорезонаторах, накачиваемых лазерными источниками с постоянным излучением, сильное влияние оказывают тепловые эффекты, такие как терморелракция и тепловое расширение [8–10]. Влияние этих эффектов практически неизбежно в реаль-

ных высокодобротных микрорезонаторных структурах из-за высокой концентрации электромагнитного поля внутри микрорезонатора. Оно проявляется в виде различных тепловых дрейфов, флуктуаций и неустойчивостей [10–12]. Традиционно тепловые процессы рассматриваются как паразитные, осложняющие реализацию нелинейно-оптических взаимодействий в высокодобротных микрорезонаторах, в том числе и таких активно изучаемых, как процесс генерации оптических частотных гребенок и различных диссипативных солитонов [13–19].

К настоящему времени тепловые эффекты хорошо изучены для процесса генерации светлых солитонов в микрорезонаторах с аномальной дисперсией групповых скоростей [14, 20, 21] и разработан ряд методов для минимизации их влияния, например, различные схемы модуляции частоты и мощности накачки [22–25], различные схемы обратной связи [26], использование криогенных температур [27] и дополнительных лазерных источников [28, 29]. Так-

* E-mail: v.lobanov@rqc.ru

же можно снизить влияние тепловых эффектов, если работать в режиме затягивания, когда частота излучения лазера накачки привязана к собственной частоте микрорезонатора, что компенсирует ее тепловой сдвиг [30–35].

В то же время для темных солитонов или платиконов (солитонов с плоской вершиной), существующих при нормальной дисперсии групповых скоростей [36, 37], эти вопросы изучены существенно меньше. Стоит отметить, что такие оптические сигналы обладают рядом преимуществ по сравнению со светлыми солитонами, в том числе гораздо большей эффективностью преобразования энергии накачки в энергию генерируемых спектральных компонент [38, 39], и успешно применяются при решении различных актуальных задач, например, в телекоммуникационных системах [40, 41]. Поэтому, несомненно важной и актуальной задачей является исследование сложной динамики, являющейся результатом взаимодействия нелинейно-оптических и тепловых процессов в высокодобротных микрорезонаторах при нормальной дисперсии групповых скоростей. В данной работе мы численно изучили свойства платиконов в нагретых микрорезонаторах и показали, что в случае «положительных» тепловых эффектов, когда направление теплового сдвига резонансных частот микрорезонатора совпадает с направлением нелинейного сдвига, устойчивы наиболее широкие высокоэнергетичные платиконы, длительность которых близка к времени обхода в резонаторе (или, что тоже самое в рассматриваемом случае, к периоду повторения платикона). В случае «отрицательных» тепловых эффектов устойчивость сохраняют узкие низкоэнергетичные платиконы с длительностью, существенно меньшей времени обхода в резонаторе. Более того, нами было обнаружено, что в микрорезонаторах с «отрицательными» тепловыми эффектами взаимодействие кубично-нелинейных и тепловых процессов может обеспечить возможность генерации платиконов без применения других методов, считающихся необходимыми в иных случаях. Обычно, для генерации темных солитонов используют либо сложные микрорезонаторные структуры [39, 42] или фотонно-кристаллические микрорезонаторы [43] для управления законом дисперсии, либо системы с амплитудно-модулированной или двухчастотной или импульсной накачкой [44, 45], либо специальные режимы, такие как режим затягивания [32, 35, 46–48]. Нами было показано, что при наличии «отрицательных» тепловых эффектов возможна генерация платиконов как при перестройке час-

тоты накачки, так и без нее, если отношение времени жизни фотона в микрорезонаторе к времени тепловой релаксации достаточно велико.

2. МОДЕЛЬ

Для численного анализа нами использовалась система из двух уравнений, описывающих нелинейную динамику в резонаторе в присутствии тепловых эффектов: уравнение Луджиато–Лефевра (нелинейное уравнение Шредингера с диссипацией и накачкой) [37] для медленно меняющейся огибающей Ψ поля в резонаторе и скоростное уравнение для нормированного теплового сдвига резонансной частоты микрорезонатора Θ [10–12, 14]:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \Psi}{\partial \tau} &= i \frac{d_2}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} - [1 + i(\alpha - \Theta)]\Psi + i|\Psi|^2\Psi + f, \\ \frac{\partial \Theta}{\partial \tau} &= \frac{2}{\kappa t_T} \left(\frac{n_{2T}}{n_2} \frac{U}{2\pi} - \Theta \right).\end{aligned}\quad (1)$$

$\tau = \kappa t/2$ — нормированное время, $\kappa = \omega_0/Q$ — полный коэффициент потерь в резонаторе (Q — нагруженная добротность), ω_0 — частота моды накачки, $\varphi \in [-\pi; \pi]$ — азимутальный угол в резонаторе в системе координат, вращающейся с угловой скоростью, равной области свободной дисперсии (ОСД) микрорезонатора D_1 , $d_2 = 2D_2/\kappa$ — нормированный коэффициент дисперсии групповых скоростей (ДГС), положительный для аномальной ДГС и отрицательный — для нормальной. Предполагается, что собственные частоты микрорезонатора описываются следующим соотношением:

$$\omega_\mu = \omega_0 + D_1\mu + \frac{D_2}{2}\mu^2,$$

где μ — номер моды, отсчитываемый от моды накачки. $\alpha = 2(\omega_0 - \omega_p)/\kappa$ — нормированная отстройка частоты накачки ω_p от моды накачки. Нормированная амплитуда накачки задается следующим выражением (см. [14]):

$$f = \sqrt{\frac{8\omega_p c n_2 \eta P_{\text{in}}}{\kappa^2 n^2 V_{\text{eff}}}},$$

где c — скорость света, n_2 — коэффициент кубичной нелинейности микрорезонатора, P_{in} — входная мощность, n — показатель преломления для моды микрорезонатора, V_{eff} — эффективный объем моды, η — коэффициент связи [$\eta = 1/2$ для режима критической связи). Нормированный теплоиндуцированный

сдвиг резонансной частоты микрорезонатора является результатом либо терморефрактивного эффекта

$$\Theta = \frac{2}{n} \frac{dn}{dT} Q \delta T$$

либо эффекта теплового расширения

$$\Theta = 2\alpha_L Q \delta T,$$

либо их комбинации (δT — изменение температуры, α_L — коэффициент теплового расширения). В системе (1)

$$U = \int |\Psi|^2 d\varphi,$$

n_{2T} — эффективный коэффициент тепловой нелинейности, t_T — время тепловой релаксации. Стоит отметить, что как видно из второго уравнения системы (1), важно не столько абсолютное значение времени тепловой релаксации, сколько его отношение к времени жизни фотона в резонаторе t_{ph} , так как $2/\kappa t_T = 2t_{ph}/t_T$. Тепловые параметры t_T и n_{2T} зависят как от материала микрорезонатора, так и от его геометрии, и могут существенно различаться для эффектов терморефракции и теплового расширения [8, 11]. Однако в ряде случаев возможно пренебречь одним из этих эффектов, например, когда для компенсации теплового расширения используются специальные покрытия или композитные структуры [49, 50]. Для простоты и наглядности мы тоже будем рассматривать только один обобщенный тепловой эффект.

3. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ УРОВНИ И УСТОЙЧИВОСТЬ ТЕМНЫХ СОЛИТОНОВ ПРИ НАЛИЧИИ ТЕПЛОВЫХ ЭФФЕКТОВ

Сначала методом релаксации были найдены стационарные решения системы уравнений (1) при

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = 0, \quad \frac{\partial \Theta}{\partial \tau} = 0$$

в виде темных солитонов или платиконов путем решения следующего уравнения:

$$i \frac{d_2}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} - \left[1 + i \left(\alpha - \frac{n_{2T}}{n_2} \frac{U}{2\pi} \right) \right] \Psi + i |\Psi|^2 \Psi + f = 0. \quad (2)$$

Затем при помощи системы уравнений (1) проверялась устойчивость найденных решений путем наложения на них шума (аддитивного или мультипликативного) и исследования их динамики на достаточно длительных временных интервалах (до

$\tau \approx 10^4$). Платиконы, сохраняющие свою структуру при распространении, считались устойчивыми. Подобное исследование было проведено для широких диапазонов значений амплитуды накачки ($f = 1.5 \dots 5$), нормированных времени тепловой релаксации ($2/\kappa t_T = 0.001 \dots 10$) и коэффициента тепловой нелинейности, причем как для «положительных», так и для «отрицательных» тепловых эффектов, а именно при

$$-20 \leq n_{2T}/n_2 \leq 20.$$

При моделировании считалось, что $d_2 = -0.02$ и было проверено, что результаты оставались качественно такими же и для других значений коэффициента дисперсии групповых скоростей d_2 .

В отсутствие тепловых эффектов в одном и том же спектральном диапазоне может существовать несколько энергетических уровней, соответствующих стабильным платиконам разной ширины, образующих структуру специального вида — collapsed snaking [36, 51]. Зависимость энергии платиконов U от отстройки частоты накачки α показана на левой панели рис. 1 для $f = 3$, $n_{2T}/n_2 = 0$. Области, соответствующие устойчивым решениям, выделены толстыми красными линиями. Более высокие уровни соответствуют более широким платиконам. Как видно из рисунка, области устойчивости становятся уже с уменьшением ширины платиконов.

Далее исследовался случай «положительных» тепловых эффектов ($n_{2T}/n_2 > 0$). В этом случае тепловой сдвиг резонансных частот имеет то же направление, что и нелинейный сдвиг, и наблюдается сдвиг, растяжение и трансформация энергетических уровней платиконов (сравните левую и правую панели рис. 1). Как видно, тепловая нелинейность частично снимает вырождение энергетических уровней. Отметим, что структура энергетических уровней не зависит от времени тепловой релаксации. Было обнаружено, что даже при заметном сдвиге различных уровней друг относительно друга переход между ними при перестройке частоты накачки практически невозможен: при увеличении отстройки платикон переходит в низкоинтенсивный однородный фоновый сигнал, а при уменьшении — в высокоинтенсивный.

Устойчивость платиконов изучалась для различных комбинаций параметров f , n_{2T}/n_2 и $2/\kappa t_T$. Было выявлено, что в случае положительной тепловой нелинейности устойчивыми остаются только высокоэнергетические платиконы с нескольких наиболее высоких энергетических уровней (число таких уровней растет с увеличением амплитуды накачки

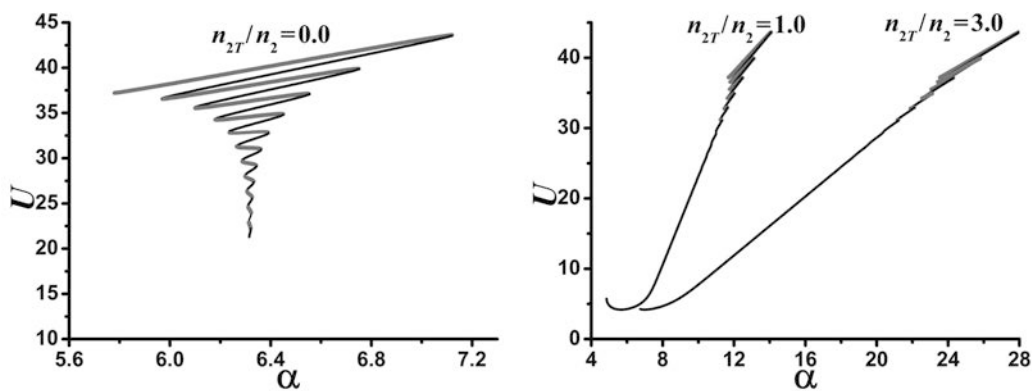


Рис. 1. Левая панель: зависимость энергии платикона U от отстройки частоты накачки α в отсутствие тепловых эффектов ($n_{2T}/n_2 = 0$). Красные линии соответствуют устойчивым платиконам. Правая панель: энергетические уровни платиконов при наличии тепловых эффектов. Красные линии соответствуют устойчивым платиконам при $2/\kappa t_T = 0.1$. Во всех случаях $f = 3$, $d_2 = -0.02$

f). Длительность таких платиконов близка к времени обхода в резонаторе $2\pi/D_1$, что соответствует угловой ширине, близкой к 2π . Области устойчивости становятся шире и смещаются в сторону больших значений отстройки с ростом коэффициента тепловой нелинейности (см. правую панель на рис. 1). При малых значениях нормированного коэффициента тепловой нелинейности устойчивость платиконов на этих уровнях не зависит от времени тепловой релаксации. Однако, если n_{2T}/n_2 превышает некоторое предельное значение, то появляется диапазон времен тепловой релаксации t_T , для которого неустойчивыми могут быть даже платиконы с верхних уровней. Зависимость диапазона неустойчивости от амплитуды накачки и коэффициента тепловой нелинейности представлена на рис. 2. Например, платиконы, отмеченные красными линиями на правой панели рис. 1 устойчивы для всех значений $2/\kappa t_T$ при $n_{2T}/n_2 = 1.0$ и могут быть неустойчивы при $1.58 \leq 2/\kappa t_T \leq 5.9$ для $n_{2T}/n_2 = 3.0$.

Пороговое значение нормированного коэффициента тепловой нелинейности, при превышении которого может проявляться неустойчивость платиконов, уменьшается с ростом амплитуды накачки (см. левую панель на рис. 2). Область неустойчивости становится шире с ростом как коэффициента тепловой нелинейности, так и амплитуды накачки (см. рис. 2). На левой панели рис. 3 представлены три возможных сценария динамики платикона в зависимости от величины времени тепловой релаксации для $n_{2T}/n_2 = 10$, $f = 3$, $\alpha = 71$. Они были получены путем моделирования эволюции входного плати-

конного импульса с амплитудным профилем, представленным на правой панели рис. 3, и наложенным слабым шумом. Энергия устойчивых решений сохраняется в двух случаях, при $2/\kappa t_T = 0.01$ и при $2/\kappa t_T = 0.3$. Для значений $2/\kappa t_T$ вблизи границы области неустойчивости платиконы могут испытывать осцилляции энергии (зеленая область), а для значений глубоко внутри, например, для $2/\kappa t_T = 0.4$, они быстро затухают (синяя линия, быстро стремящаяся к нулю).

Наиболее интересна нижняя граница области неустойчивости, так как в большинстве микрорезонаторных структур время тепловой релаксации существенно больше времени жизни фотона и, следовательно, $2/\kappa t_T \ll 1$. Согласно результатам проведенного исследования, для широкого диапазона параметров для положительной тепловой нелинейности платиконы устойчивы при $2/\kappa t_T \leq 0.1$, что справедливо для большинства реальных микрорезонаторов.

Далее рассмотрим случай «отрицательных» тепловых эффектов (отрицательной тепловой нелинейности). Было установлено, что если $n_{2T} < 0$, то условия устойчивости существенно отличаются от рассмотренного ранее случая. Неустойчивость проявляется, когда модуль коэффициента тепловой нелинейности $|n_{2T}/n_2|$ превышает некое предельное значение, которое уменьшается с ростом амплитуды накачки (см. рис. 4, 5). Ниже этого порога (при $|n_{2T}/n_2| \leq 1$ для $f = 3$), высокоэнергетичные платиконы с дискретных уровней и низкоэнергетичные с квазинепрерывного уровня устойчивы.

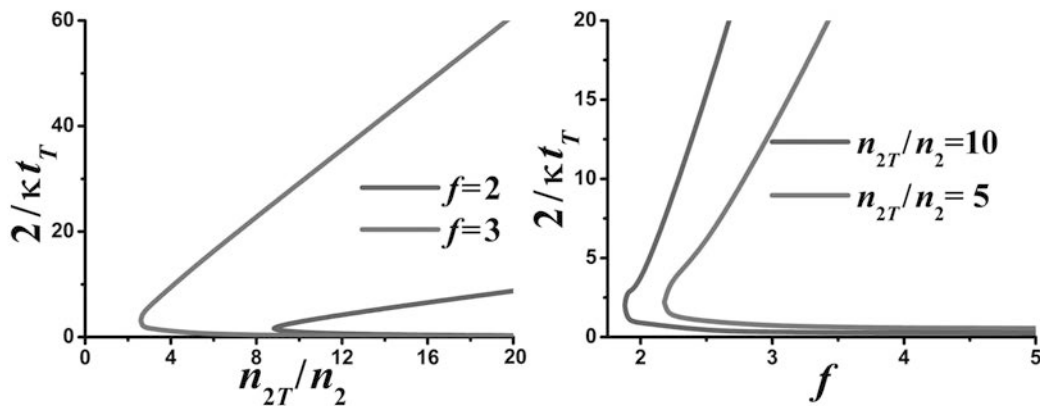


Рис. 2. Зависимость области устойчивости платиконов от коэффициента тепловой нелинейности (левая панель) и от амплитуды накачки (правая панель). Для параметров, указанных на каждой из панелей, платиконы могут быть неустойчивыми в области между сплошными линиями соответствующих цветов. Во всех случаях $d_2 = -0.02$

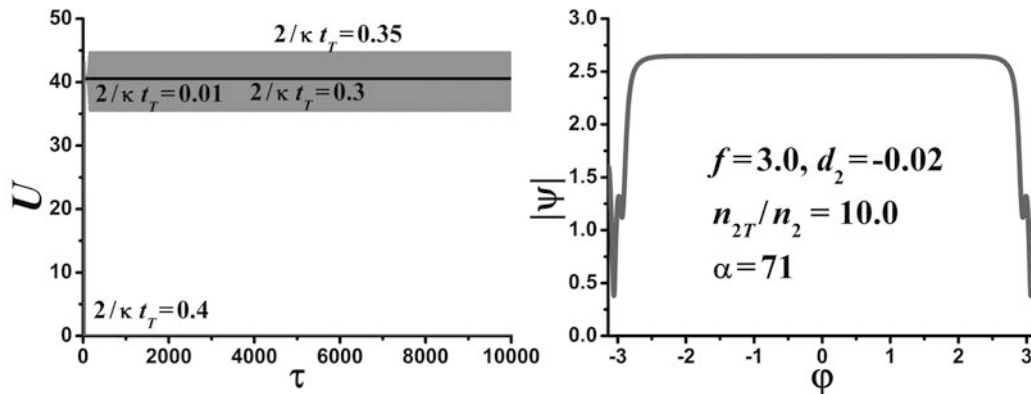


Рис. 3. Левая панель: сценарии эволюции энергии в резонаторе при начальном условии в виде платикона и различных значениях времени тепловой релаксации при $n_{2T}/n_2 = 10$, $f = 3$, $\alpha = 71$: устойчивое распространение при $2/\kappa t_T = 0.01$ и $2/\kappa t_T = 0.3$ — сплошная черная линия, осцилляции энергии при $2/\kappa t_T = 0.35$ — зеленая полоса, быстрое затухание при $2/\kappa t_T = 0.4$ — синяя линия. Правая панель: амплитудный профиль входного сигнала

С ростом величины тепловой нелинейности высокоэнергетичные широкие платиконы становятся неустойчивыми и устойчивость в основном сохраняют только низкоэнергетичные узкие платиконы, длительность которых существенно меньше времени обхода в резонаторе, а угловая ширина существенно меньше 2π . Зависимость энергии платикона U от отстройки частоты накачки α представлена на рис. 4 для $f = 3$ при $n_{2T}/n_2 = -1.0$ (левая панель) и $n_{2T}/n_2 = -3.0$ (правая панель). Области устойчивости выделены красными линиями. Структура спектральных областей устойчивости (совокупность диапазонов отстроек накачки) может быть достаточно сложной и сильно зависит от величины нор-

мированного на время жизни фотона времени тепловой релаксации $2/\kappa t_T$. Области устойчивости показаны на рис. 5, где каждая панель соответствует определенному значению тепловой нелинейности. Для наглядности на каждой панели несколько идентичных кривых $U(\alpha)$, на которых отмечены области устойчивости, разнесены в вертикальном направлении друг относительно друга, чтобы дать возможность сравнить области устойчивости для различных значений $2/\kappa t_T$ при фиксированных остальных параметрах.

Можно заметить, что разница между областями устойчивости для различных времен тепловой релаксации становится все более и более заметной с

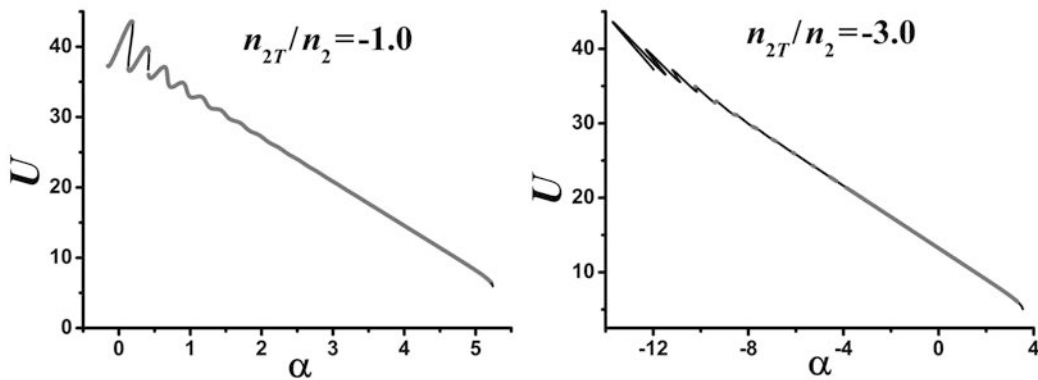


Рис. 4. Энергетические уровни платиконов при наличии «отрицательных» тепловых эффектов. Красные линии соответствуют устойчивым платиконам при $2/\kappa t_T = 0.1$. Во всех случаях $f = 3$, $d_2 = -0.02$

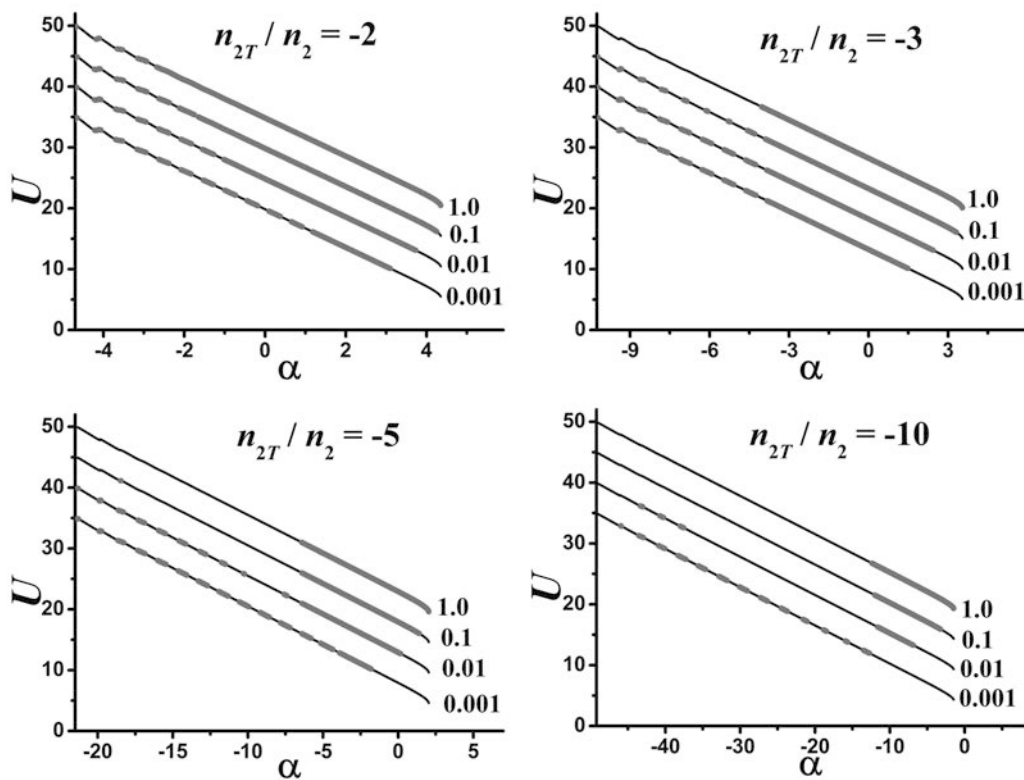


Рис. 5. Области устойчивости, выделенные красными линиями, для различных значений $2/\kappa t_T$. Для наглядности на каждой панели, соответствующей определенному значению нормированного коэффициента тепловой нелинейности, несколько идентичных кривых $U(\alpha)$ сдвинуты друг относительно друга в вертикальном направлении. Нижняя кривая на каждой панели получена путем численного решения уравнения (2). Кривые для $2/\kappa t_T = 0.01, 0.1$ и 1 являются копиями кривой для $2/\kappa t_T = 0.001$, сдвинутыми вдоль вертикальной оси на 5, 10 и 15, соответственно

ростом абсолютного значения нормированного коэффициента тепловой нелинейности (см. рис. 5). Ес-

ли отношение времени жизни фотона к времени тепловой релаксации $2/\kappa t_T$ превышает некоторое кри-

тическое значение, тогда существует сравнительно широкая область устойчивости вблизи правой границы области существования. Эта область становится уже с уменьшением $2/\kappa t_T$. Если $2/\kappa t_T$ меньше критического значения в этой спектральной области, платикон испытывает быстрое затухание. Это показано на рис. 6 для параметров с правой верхней панели рис. 5.

Вне этой наиболее широкой области устойчивости (слева от нее) может быть несколько узких областей устойчивости, но они существуют, если $2/\kappa t_T$ не превышает некоторое предельное значение (см. рис. 5 и 7). Характерные сценарии динамики платикона в этих областях представлены на рис. 7 для параметров с правой верхней панели рис. 5. Отметим, что с дальнейшим ростом величины тепловой нелинейности для наиболее широкой области устойчивости появляется и верхняя граница для $2/\kappa t_T$. Это пороговое значение уменьшается с ростом $|n_{2T}/n_2|$ и увеличивается с уменьшением отстройки частоты накачки (так как эта отстройка в основном отрицательна, то уменьшение означает увеличение абсолютной величины отстройки). Например, для $f = 3$ и $n_{2T}/n_2 = -20.0$ оно варьируется от $2/\kappa t_T = 0.68$ вблизи правой границы ($\alpha = -8.29$) до $2/\kappa t_T = 2.19$ на левой границе наиболее широкой области устойчивости ($\alpha = -25$).

Стоит отметить, что спектральная ширина (диапазон отстроек) области устойчивости при большой отрицательной тепловой нелинейности существенно меньше, чем при такой же по абсолютному значению, но положительной. Например, при $n_{2T}/n_2 = -20.0$, $f = 3$ нормированная ширина области устойчивости при $2/\kappa t_T = 0.1$ составляет $\delta\alpha_{stab} \approx 10$, а для $n_{2T}/n_2 = 20.0$ дает $\delta\alpha_{stab} \approx 35$.

Обобщая, можно сделать следующие выводы: тепловые эффекты приводят к изменению структуры энергетических уровней платиконов, частично снимая их вырождение по частоте. Если тепловая нелинейность становится достаточно большой, то может проявляться неустойчивость. В случае «положительных» тепловых эффектов устойчивы наиболее широкие высокоэнергетичные платиконы (см. правую панель на рис. 3). В случае «отрицательных» тепловых эффектов устойчивость сохраняют узкие низкоэнергетичные платиконы (см. правую панель на рис. 6).

4. ТЕПЛОИНДУЦИРОВАННАЯ ГЕНЕРАЦИЯ ПЛАТИКОНОВ

Также мы исследовали нелинейные эффекты, проявляющиеся при линейной по времени перестройке частоты накачки, описываемой соотношением $\alpha(\tau) = \alpha(0) + v\tau$, для различных значений амплитуды накачки f , нормированного времени тепловой релаксации $2/\kappa t_T$ и нормированного коэффициента тепловой нелинейности n_{2T}/n_2 . Отметим, что метод сканирования частоты накачки является стандартным методом генерации светлых солитонов в оптических микрорезонаторах [14]. Сканирование с увеличением отстройки будем считать прямым, а с уменьшением - обратным. При численном моделировании на каждом шаге сначала рассчитывался тепловой сдвиг Θ по известному значению энергии в резонаторе U , а затем методом расщепления решалось уравнение для поля Ψ . В случае положительной тепловой нелинейности $n_{2T}/n_2 > 0$ для широкого диапазона параметров при сканировании наблюдались стандартные треугольные резонансные кривые (см. рис. 8) и отсутствовала генерация новых спектральных компонент.

Однако, если тепловые эффекты являются «отрицательными», скорость перестройки частоты и отношение времени тепловой релаксации к времени жизни фотона достаточно малы, то в определенном диапазоне параметров наблюдается генерация платиконов. Для случая прямого сканирования было выявлено два режима генерации. Первый из них — режим плавной генерации — плавный переход от однородного решения к платикону при малых значениях амплитуды накачки f (рис. 9), который реализуется при сравнительно малых величинах $|n_{2T}/n_2|$ для узкого диапазона значений f , зависящего от конкретной величины коэффициента тепловой нелинейности. При $v = 0.001$ и $2/\kappa t_T = 0.1$ такой режим наблюдался для $|n_{2T}/n_2| \in [0.5; 2.1]$ и $f \in [1.3; 2.1]$. Признаком генерации может служить слабое искажение резонансной кривой (см. левую верхнюю панель на рис. 9). Точка, где начинается это искажение, совпадает с точкой, где происходит резкое изменение распределения поля в резонаторе (нижняя левая панель на рис. 9), а также спектр генерируемого сигнала (нижняя правая панель на рис. 9). Было проверено, что сгенерированные таким образом платиконы стабильно распространяются, если перестройка частоты накачки отключена. Это полностью соответствует результатам, полученным при исследовании устойчивости платиконов при наличии тепловых эффектов.

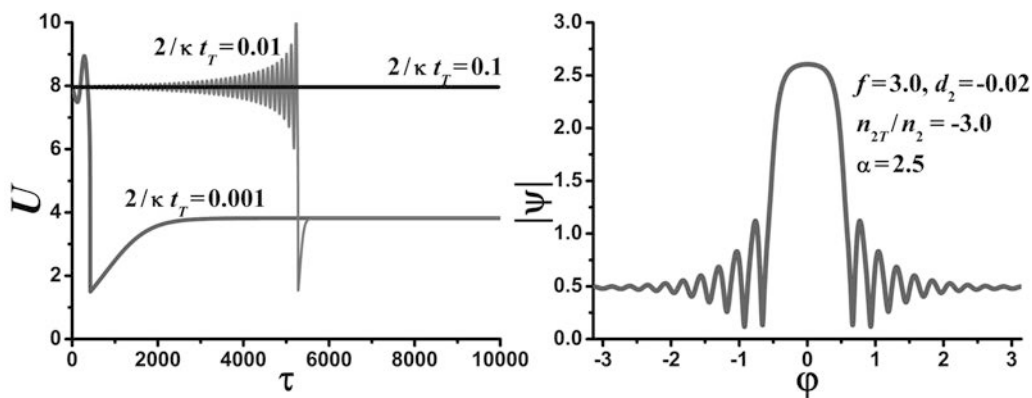


Рис. 6. Левая панель: сценарии эволюции энергии в резонаторе при начальном условии в виде платикона и различных значениях времени тепловой релаксации при $n_{2T}/n_2 = -3.0$, $f = 3$, $\alpha = 2.5$: устойчивое распространение при $2/\kappa t_T = 0.1$ — сплошная черная линия, неустойчивое распространение и быстрое затухание при $2/\kappa t_T = 0.01$ (красная линия) и $2/\kappa t_T = 0.001$ (синяя линия). Правая панель: амплитудный профиль входного сигнала

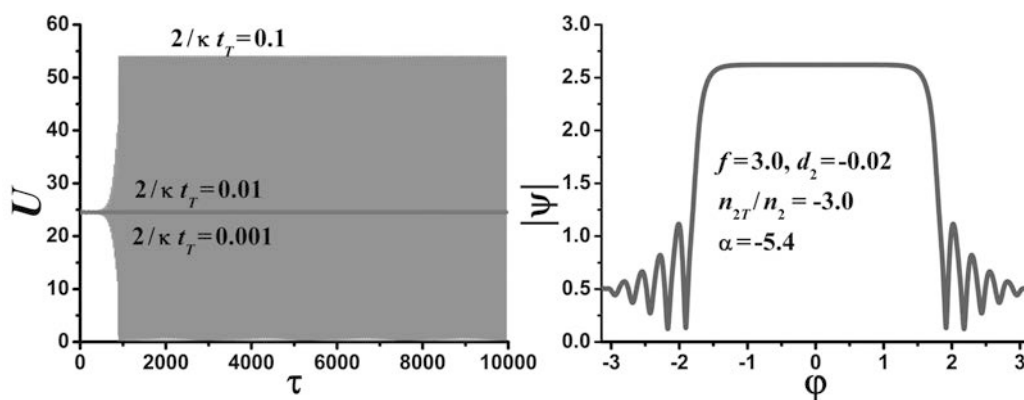


Рис. 7. Левая панель: сценарии эволюции энергии в резонаторе при начальном условии в виде платикона и различных значениях времени тепловой релаксации при $n_{2T}/n_2 = -3.0$, $f = 3$, $\alpha = -5.4$: устойчивое распространение при $2/\kappa t_T = 0.01$ и $2/\kappa t_T = 0.01$ — сплошная красная линия, неустойчивое распространение, распад и последующие осцилляции энергии при $2/\kappa t_T = 0.1$ — зеленая полоса. Правая панель: амплитудный профиль входного сигнала

При дальнейшем увеличении амплитуды накачки f , когда она лежит вне диапазона, необходимого для плавной генерации, генерация платикона не происходит, а наблюдаются ангармонические осцилляции энергии, причем только в моде накачки, которые при дальнейшей перестройке частоты переходят в низкоинтенсивное однородное решение. Отметим, что если в области осцилляций остановить перестройку частоты, они будут продолжаться.

Неожиданно оказалось, что для еще больших значений амплитуды накачки был выявлен второй режим генерации платиконов — осцилляторный. В этом режиме описанные ранее осцилляции трансформируются в платиконный режим при дальней-

шей перестройке частоты накачки (см. рис. 10). Стоит отметить, что критические для перехода в тот или иной режим значения амплитуды накачки зависят от конкретной комбинации скорости перестройки частоты, времени тепловой релаксации и коэффициента тепловой нелинейности.

Также было обнаружено, что если сканирование частоты остановить после возбуждения платикона и поменять его направление, то осцилляции, наблюдавшиеся при прямом скане, не будут возникать, и, следовательно, платиконный режим может наблюдаться при меньших значениях отстройки, чем при прямом сканировании. При дальнейшем росте амплитуды накачки наблюдается переход из обла-

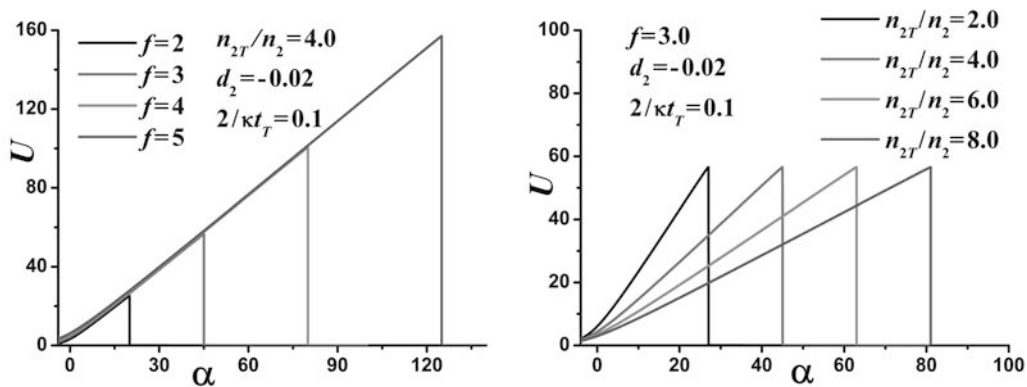


Рис. 8. Эволюция энергии U в резонаторе при изменении отстройки частоты накачки α для различных амплитуд накачки f (левая панель) и различных значений коэффициента тепловой нелинейности n_{2T}/n_2 (правая панель) при $2/\kappa t_T = 0.1$, $d_2 = -0.02$, $v = 0.001$

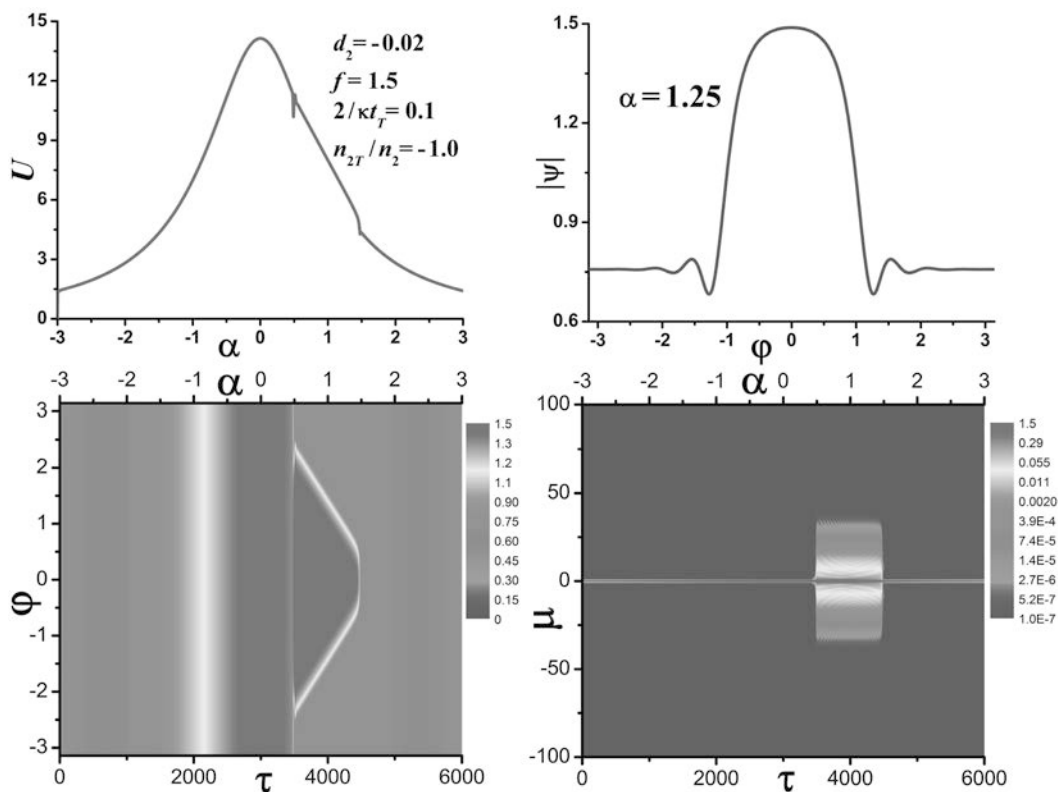


Рис. 9. Режим плавной генерации при $2/\kappa t_T = 0.1$, $n_{2T}/n_2 = -1.0$, $d_2 = -0.02$, $f = 1.5$ and $v = 0.001$. Верхняя левая панель: изменение энергии U при прямой перестройке отстройки частоты накачки α . Верхняя правая панель: амплитудный профиль сгенерированного платикона при $\alpha = 1.4$. Нижние панели: эволюция распределения поля (слева) и спектра (справа)

сти гарантированной генерации платикона к области возможной генерации. В этом случае от реализации к реализации платикон может либо возбуждаться, либо нет. При еще большей амплитуде на-

качки генерация платиконов не происходит.

Для уточнения области применимости данного метода генерации платиконов, мы определили допустимый диапазон параметров, обеспечивающий воз-

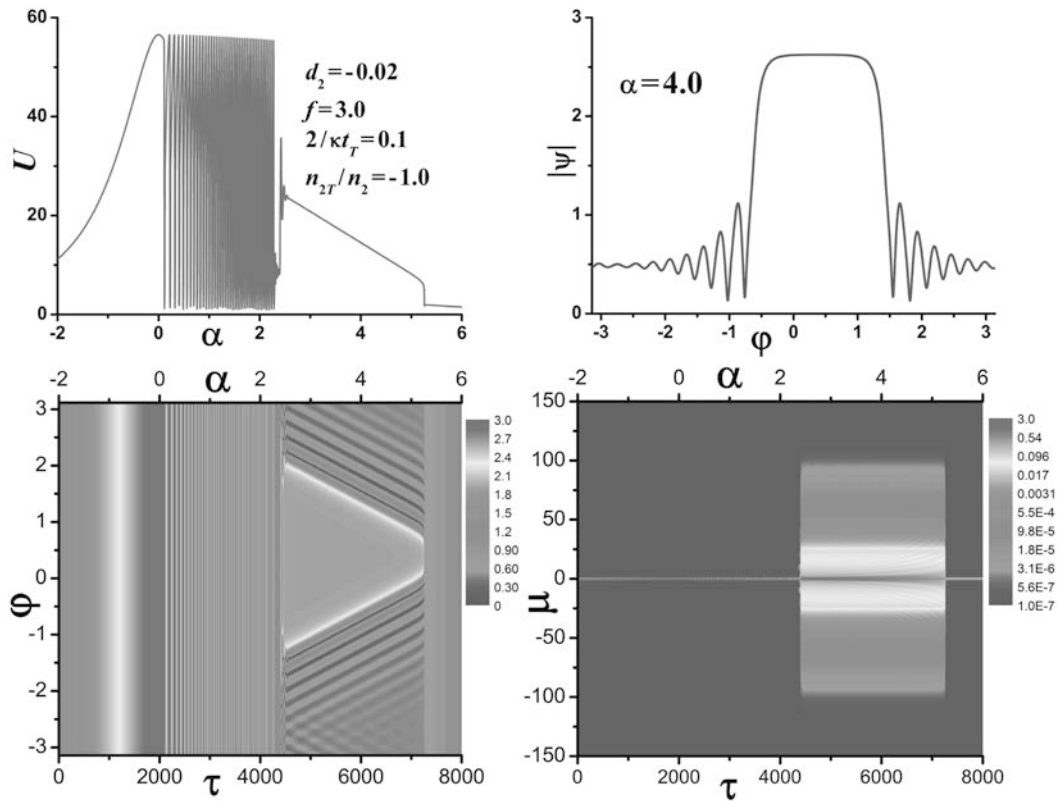


Рис. 10. Осцилляторный режим генерации при $2/\kappa t_T = 0.1$, $n_{2T}/n_2 = -1.0$, $d_2 = -0.02$, $f = 3.0$ and $v = 0.001$. Верхняя левая панель: изменение энергии U при прямой перестройке отстройки частоты накачки α . Верхняя правая панель: амплитудный профиль сгенерированного платикона при $\alpha = 1.4$. Нижние панели: эволюция распределения поля (слева) и спектра (справа)

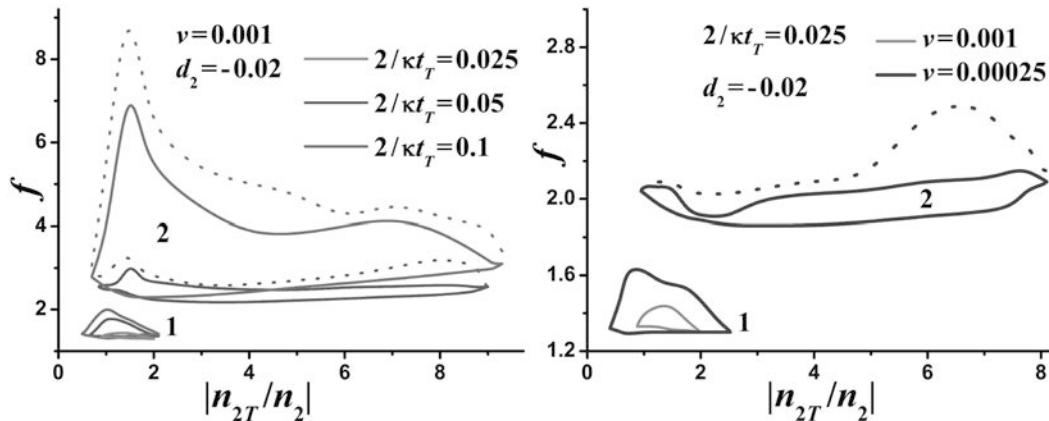


Рис. 11. Левая панель: области генерации платиконов для различных значений $2/\kappa t_T$ при $d_2 = -0.02$ и $v = 0.001$. Область 1 соответствует режиму плавной генерации, область 2 — осцилляторному режиму. Различные цвета линий соответствуют различным значениям времени тепловой релаксации. Между сплошной и штриховой линиями того же цвета генерация возможна, но в каждой отдельной реализации результат непредсказуем. Правая панель: области генерации для различных значений скорости перестройки частоты v при $d_2 = -0.02$ и $2/\kappa t_T = 0.025$

буждение таких структур в координатах, задающих нелинейную и тепловую динамику рассматри-

ваемой системы: нормированный коэффициент тепловой нелинейности n_{2T}/n_2 и безразмерная ампли-

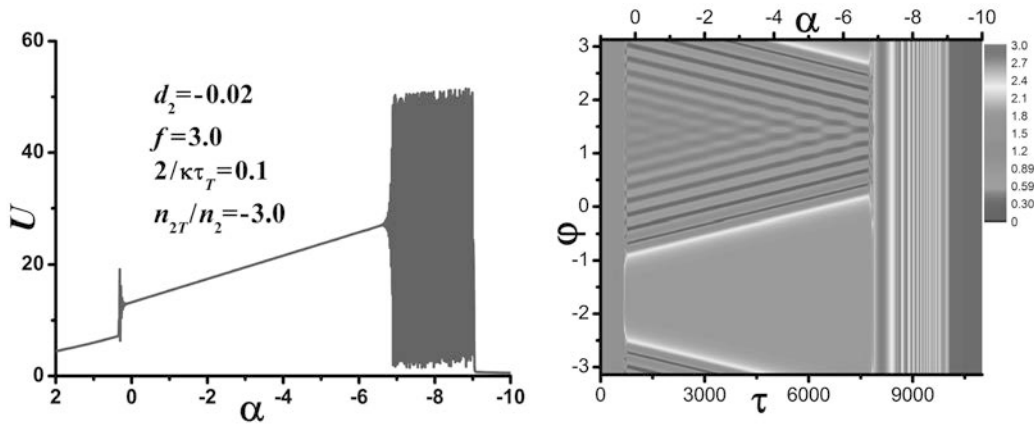


Рис. 12. Генерация платикона при обратной перестройке частоты накачки при $n_{2T}/n_2 = -3.0$, $d_2 = -0.02$ и $f = 3.0$. Левая панель: изменение энергии в резонаторе U при изменении отстройки α . Правая панель: эволюция распределения поля в резонаторе при обратной перестройке частоты

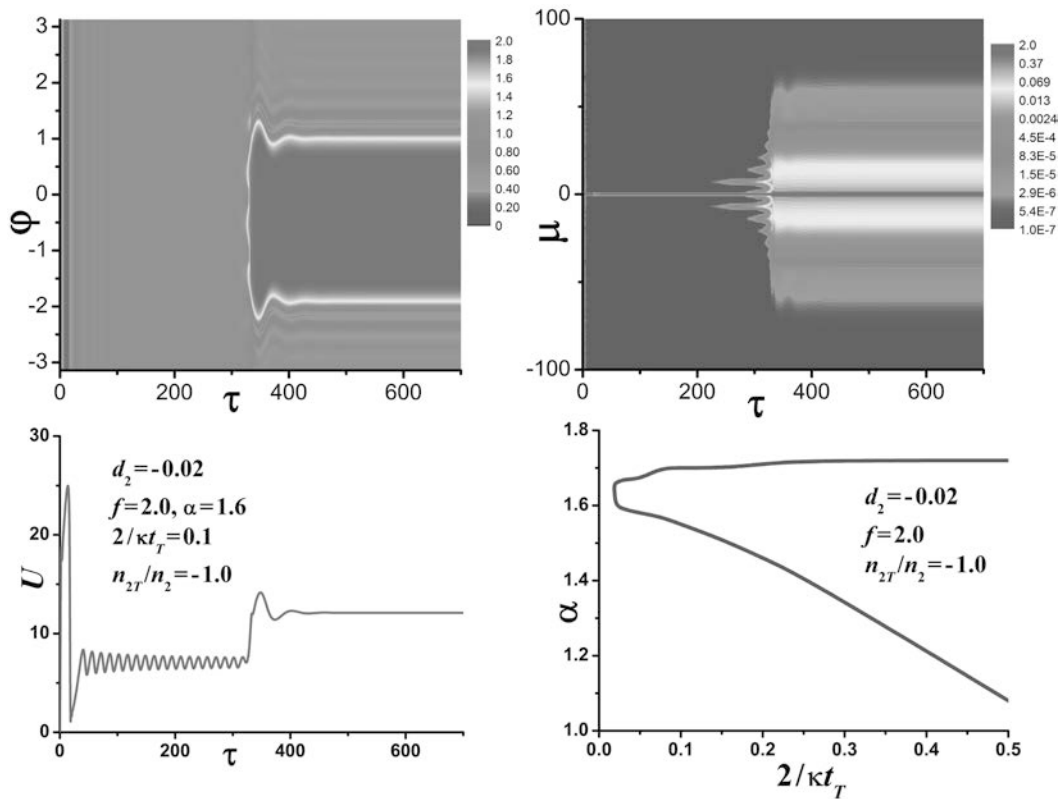


Рис. 13. Генерация платикона без перестройки частоты при $n_{2T}/n_2 = -1.0$, $d_2 = -0.02$ и $f = 2.0$. Верхние панели: эволюция распределения поля (слева) и спектра (справа) при $2/\kappa\tau_T = 0.1$ и $\alpha = 1.6$. Нижняя левая панель: зависимость энергии в резонаторе U от времени τ . Нижняя правая: диапазон отстроек частоты накачки α , допускающий генерацию платикона без перестройки частоты, в зависимости от времени тепловой релаксации $2/\kappa\tau_T$

туда накачки f для различных значений времени тепловой релаксации (см. левую панель на рис. 11; различные цвета соответствуют различным значениям $2/\kappa\tau_T$). Области гарантированной генерации

ограничены сплошными линиями; область возможной генерации — сплошной и штриховой линиями. Чтобы определить эти границы наиболее точно, для каждого набора параметров генерировались

несколько вариантов начальных условий и моделировались процессы в микрорезонаторе при прямой перестройке частоты.

Численный анализ показал, что области генерации становятся меньше с ростом времени тепловой релаксации (либо с уменьшением параметра $2/\kappa t_T$). Особенно это заметно для области осцилляторной генерации (обозначена цифрой 2 на рис. 11). При $2/\kappa t_T = 0.025$ и $v = 0.001$ (зеленые линии на левой панели рис. 11) такой режим отсутствовал. Однако уменьшение скорости перестройки частоты позволяет скомпенсировать эффект роста времени тепловой релаксации: при $2/\kappa t_T = 0.025$ и $v = 0.00025$ опять наблюдаются две области генерации (правая панель на рис. 11).

Также было выявлено, что области генерации становятся уже с ростом абсолютного значения коэффициента дисперсии групповых скоростей. Например, для областей, обозначенных красными линиями на левой панели рис. 11, наблюдалось их заметное уширение при уменьшении модуля коэффициента дисперсии с 0.02 до 0.01, а при его увеличении с 0.02 до 0.08 область осцилляторного режима исчезала. При увеличении коэффициента дисперсии для сохранения генерации платиконов также необходимо уменьшать скорость перестройки частоты. Интересно, что при достаточно больших значениях модуля коэффициента дисперсии (например, при $v = 0.0001$, $d_2 = -0.08$, $2/\kappa t_T = 0.1$, $n_{2T}/n_2 = -4.0$) наблюдалась трансформация процесса генерации устойчивого стационарного платикона в генерацию осциллирующего платикона-бризера.

Генерация платиконов также наблюдалась и при обратной перестройке частоты (при уменьшении отстройки со временем) (см. рис. 12). Было обнаружено, что в ряде случаев генерация при обратном сканировании обеспечивает генерацию платиконов в большем диапазоне значений коэффициента тепловой нелинейности. Однако, поскольку, как было показано ранее, высокоэнергетичные платиконы могут быть неустойчивы при отрицательной тепловой нелинейности, то область генерации при обратном скане существенно ограничена областью устойчивости платиконов.

Более того, было обнаружено, что в ряде случаев генерация платиконов возможна при слабом шумоподобном начальном условии и без сканирования частоты накачки (см. рис. 13). Это позволяет существенно упростить систему генерации за счет отказа от сложных систем перестройки и контроля частоты лазера, а также использовать для накачки более стабильные и доступные неперестраиваемые

лазеры. Область отстроек, где возможна генерация без перестройки частоты, сужается с ростом времени тепловой релаксации (см. рис. 13, правая нижняя панель).

Согласно предварительным оценкам, основывающимся на используемой упрощенной модели, выявленные условия генерации платиконов за счет тепловых эффектов выглядят вполне достижимыми экспериментально. Чтобы достичь $2/\kappa t_T > 0.025$ на длине волны $\lambda = 1.55 \mu\text{м}$ для времени тепловой релаксации $100 \mu\text{с}$ необходимо использовать микрорезонатор с добротностью $Q > 1.95 \cdot 10^9$, что вполне возможно в кристаллических микрорезонаторах (например, из фторида кальция [52], обладающего к тому же отрицательной терморефракцией) и практически возможно в интегральных структурах [53]. Согласно нашим численным результатам, безразмерная скорость перестройки частоты v должна быть меньше 0.001. Можно легко пересчитать эту величину в реальную скорость перестройки частоты, воспользовавшись простой формулой:

$$\frac{d\omega_p/2\pi}{dt} = v \frac{\pi c^2}{2\lambda_p^2 Q^2}.$$

Для $Q = 5 \cdot 10^9$ и $\lambda_p = 1.55 \mu\text{м}$ величина $v = 0.001$ соответствует скорости перестройки 3.65 МГц/с. Достаточно малый коэффициент дисперсии групповых скоростей может быть получен путем оптимизации формы поперечного сечения микрорезонатора [54–57]. Мощность накачки должна быть подобрана таким образом, чтобы безразмерная амплитуда, также зависящая от добротности микрорезонатора и эффективности связи, находилась в диапазоне ($f = 1.3...4$). Точный допустимый диапазон зависит от значений коэффициента тепловой нелинейности и времени тепловой релаксации.

5. ВЫВОДЫ

В данной работе изучены свойства платиконов в нагретых микрорезонаторах с нормальной дисперсией групповых скоростей и показано, что в случае «положительных» тепловых эффектов, когда направление теплового сдвига резонансных частот микрорезонатора совпадает с направлением нелинейного сдвига, устойчивы наиболее широкие высокоэнергетичные платиконы. В случае «отрицательных» тепловых эффектов устойчивость сохраняют узкие низкоэнергетичные платиконы. Показано, что в микрорезонаторах с «отрицательными» тепловыми эффектами взаимодействие кубично-нелинейных

и тепловых процессов может обеспечить возможность генерации платиконов без применения других методик, считающихся необходимыми в иных случаях. Определены условия теплоиндуцированного возбуждения платиконов.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (проект № 22-22-00872).

ЛИТЕРАТУРА

1. V. B. Braginsky, M. L. Gorodetsky, V. S. Ilchenko, *Physics Letters A*. **137**, 393 (1989).
2. V. S. Ilchenko, A. B. Matsko, *IEEE Journ. Sel. Top. Quant. El* **12**(1), 3 (2006).
3. М. Л. Городецкий. Оптические микрорезонаторы с гигантской добротностью. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2011. 416 с.
4. V. S. Ilchenko, A. B. Matsko, *IEEE Journ. Sel. Top. Quant. El* **12**(1), 15 (2006).
5. J. Ward, O. Benson, *Laser Photon. Rev.* **5**, 553 (2011).
6. D. V. Strekalov, C. Marquard, A. B. Matsko et al., *Journ. Opt.* **18**(12), 123002 (2016).
7. G. Lin, A. Coillet, Y. K. Chembo, *Adv. Opt. Photon.* **9**(4), 828 (2017).
8. V. Ilchenko, M. L. Gorodetskii, *Las. Phys.* **2**, 1004 (1992).
9. A. E. Fomin, M. L. Gorodetsky, I. S. Grudinin et al., *J. Opt. Soc. Am. B* **22**(2), 459 (2005).
10. T. Carmon, L. Yang, K. J. Vahala, *Opt. Express* **12**(20), 4742 (2004).
11. S. Diallo, G. Lin, Y. K. Chembo, *Opt. Lett.* **40**(16), 3834 (2015).
12. A. Leshem, Z. Qi, T. F. Carruthers et al., *Phys. Rev. A* **103**, 013512 (2021).
13. P. Del'Haye, A. Schliesser, O. Arcizet et al., *Nature* **450**(7173), 1214 (2007).
14. T. Herr, V. Brasch, J. D. Jost et al., *Nat. Photon.* **8**(2), 145 (2014).
15. T. J. Kippenberg, A. L. Gaeta, M. Lipson et al., *Science* **361**(6402), eaan8083 (2018).
16. A. Pasquazi, M. Peccianti, L. Razzari et al., *Phys. Rep.* **729**, 1 (2018).
17. A. Kovach, D. Chen, J. He et al., *Adv. Opt. Photon.* **12**(1), 135 (2020).
18. A. Hermans, K. Van Gasse, B. Kuyken, *APL Photonics*. **7**, 100901 (2022).
19. Y. Sun, J. Wu, M. Tan et al., *Adv. Opt. Photon.* **15**, 86 (2023).
20. C. Bao, Y. Xuan, J. A. Jaramillo-Villegas et al., *Opt. Lett.* **42**(13), 2519 (2017).
21. J. R. Stone, T. C. Briles, T. E. Drake et al., *Phys. Rev. Lett.* **121**, 063902 (2018).
22. T. Wildi, V. Brasch, J. Liu et al., *Opt. Lett.* **44**(18), 4447 (2019).
23. Q. Li, T. C. Briles, D. A. Westly et al., *Optica* **4**(2), 193 (2017).
24. V. Brasch, M. Geiselmann, T. Herr et al., *Science* **351**(6271), 357 (2016).
25. V. Brasch, M. Geiselmann, M. H. P. Pfeiffer et al., *Opt. Express* **24**(25), 29312 (2016).
26. X. Yi, Q.-F. Yang, K. Y. Yang et al., *Opt. Lett.* **41**(9), 2037 (2016).
27. G. Moille, X. Lu, A. Rao et al., *Phys. Rev. Applied* **12**, 034057 (2019).
28. S. Zhang, J. M. Silver, L. Del Bino et al., *Optica* **6**(2), 206 (2019).
29. H. Zhou, Y. Geng, W. Cui et al., *Light: Science & Applications* **8**(1), 50 (2019).
30. N. M. Kondratiev, V. E. Lobanov, A. V. Cherenkov et al., *Opt. Express* **25**(23), 28167 (2017).
31. N. G. Pavlov, S. Koptyaev, G. V. Lihachev et al., *Nature Photon.* **12**(11), 694 (2018).
32. N. M. Kondratiev, V. E. Lobanov, E. A. Lonshakov et al., *Opt. Express* **28**(26), 38892 (2020).
33. B. Shen, L. Chang, J. Liu et al., *Nature* **583**(7812), 365 (2020).
34. Н. Ю. Дмитриев, А. С. Волошин, Н. М. Кондратьев и др., *ЖЭТФ*, **162**(1), 14 (2022).
35. N. M. Kondratiev, V. E. Lobanov, A. E. Shitikov et al., *Front. Phys.* (2023).
36. V. E. Lobanov, G. Lihachev, T. J. Kippenberg et al., *Opt. Express* **23**(6), 7713 (2015).
37. C. Godey, I. V. Balakireva, A. Coillet et al., *Phys. Rev. A* **89**, 063814 (2014).
38. X. Xue, P.-H. Wang, Y. Xuan et al., *Laser & Photon. Rev.* **11**(1), 1600276 (2017).

39. B. Y. Kim, Y. Okawachi, J. K. Jang et al., *Opt. Lett.* **44**(18), 4475 (2019).
40. A. Fülöp, M. Mazur, Mikael, A. Lorences-Riesgo et al., *Nat. Comm.* **9**(1), 1598 (2018)
41. Ó. B. Helgason, A. Fülöp, J. Schröder et al., *J. Opt. Soc. Am. B* **36**(8), 2013 (2019).
42. X. Xue, Y. Xuan, P.-H. Wang et al., *Las. & Photon. Rev.* **9**(4), L23 (2015).
43. S.-P. Yu, E. Lucas, J. Zang et al., *Nat. Comm.* **13**(1), 3134 (2022).
44. V. E. Lobanov, N. M. Kondratiev, A. E. Shitikov et al., *Phys. Rev. A* **100**, 013807 (2019).
45. H. Liu, S.-W. Huang, W. Wang et al., *Photon. Res.* **10**(8), 1877 (2022).
46. W. Jin, Q.-F. Yang, L. Chang et al., *Nat. Photon.* **15**, 346 (2021).
47. G. Lihachev, W. Weng, J. Liu et al., *Nat. Commun.* **13**(1), 1771 (2022).
48. А. Е. Шитиков, А. С. Волошин, И. К. Горелов и др., *ЖЭТФ* **161**(3),1 (2022).
49. A. Savchenkov, A. Matsko, *Journ. Opt.* **20**(3), 035801 (2018).
50. J. Lim, A. A. Savchenkov, E. Dale et al., *Nat. Commun.* **8**(1), 8 (2017).
51. P. Parra-Rivas, E. Knobloch, D. Gomila et al., *Phys. Rev. A* **93**, 063839 (2016).
52. A. A. Savchenkov, A. B. Matsko, V. S. Ilchenko et al., *Opt. Express* **15**(11), 6768 (2007).
53. L. Wu, H. Wang, Q. Yang et al., *Opt. Lett.* **45**(18), 5129 (2020).
54. I. S. Grudinin, N. Yu, *Optica* **2**, 221 (2015).
55. S. Fujii, T. Tanabe, *Nanophotonics* **9**(5), 1087 (2020).
56. S.-P. Wang, T.-H. Lee, Y.-Y. Chen et al., *Micromachines*. **13**, 454 (2022).
57. Ch. Zhang, G. Kang, J. Wang, et al., *Opt. Express*. **30**, 44395 (2022).

АКТИВНОЕ БРОУНОВСКОЕ ДВИЖЕНИЕ ПЫЛЕВЫХ ЧАСТИЦ В КВАЗИОДНОМЕРНЫХ (ЦЕПОЧЕЧНЫХ) СТРУКТУРАХ В ТЛЕЮЩЕМ РАЗРЯДЕ

А. С. Светлов^{}, Е. А. Кононов, Ф. М. Трухачёв, М. М. Васильев, О. Ф. Петров*

*Объединенный институт высоких температур Российской академии наук
125412, Москва, Россия*

*Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
141701, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 18 мая 2023 г.,
после переработки 29 мая 2023 г.
Принята к публикации 30 мая 2023 г.

Представлены экспериментальные результаты исследования формирования и динамики цепочечных структур активными броуновскими частицами в тлеющем разряде постоянного тока. Механизм активного движения частиц связан с преобразованием лазерного излучения частицами в энергию собственного (не теплового) движения. С помощью анализа параметров движения (траекторий, среднеквадратичного смещения, кинетической энергии) в зависимости от интенсивности лазерного излучения, падающего на частицы, показано, что частицы являются активными броуновскими. При этом возможно управлять их движением без изменения параметров разряда. Экспериментально обнаружено, что формирование цепочечных структур и их устойчивое состояние не нарушается при кинетическом разогреве частиц с ростом их кинетической энергии более чем на порядок. Это свидетельствует о реализации механизма формирования цепочек с сильной связью между частицами, который не объясняется простым кильватерным (ионным) следом за вышестоящей частицей.

DOI: 10.31857/S0044451023110020
EDN: PNATSW

1. ВВЕДЕНИЕ

За последние десятилетия исследование активной материи (activematter) стало одним из самых захватывающих и бурно развивающихся направлений в физике «мягкого» конденсированного вещества (softmatter) [1–15]. Фундаментальный аспект исследований заключается в развитии физики неравновесных систем; физики диссипативных структур; физики хаоса; принципов самоорганизации, самосборки, зарождения жизни. Базовым элементом физики активной материи является понятие «активная броуновская частица» (АБЧ), которое обобщает понятие «броуновская частица» на случай неравновесных систем. В отличие от пассивных броуновских частиц, движение которых определяется тепловой

энергией среды, АБЧ получают некоторую дополнительную энергию движения (химическую, электромагнитную и др.). В результате АБЧ помимо случайного теплового движения, характерного для пассивных броуновских частиц, совершают также направленное движение в течение заметных промежутков времени [1–15]. Кроме того, состояние АБЧ нельзя описать в рамках равновесной термодинамики, в отличие от пассивных броуновских частиц [3]. Примером АБЧ являются бактерии и некоторые подвижные клетки [4–6], микро- и нанороботы [7], активные микрокатализаторы [8, 9], пылевые частицы в плазме и сверхтекучем гелии [10–15] и т. д. АБЧ могут двигаться независимо и могут проявлять коллективный характер [5, 16]. Средняя кинетическая энергия АБЧ может значительно превосходить среднюю кинетическую энергию (температуру) окружающей среды [1, 2]. Среди приложений физики АБЧ можно выделить следующие: развитие методов доставки лекарственных веществ, разработку новых материалов и др.

^{*} E-mail: svetlov.anton.s@gmail.com

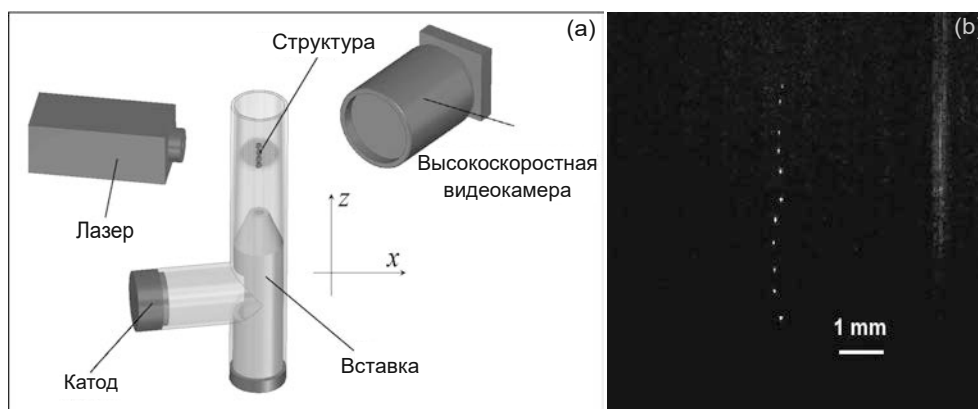


Рис. 1. Схема экспериментальной установки тлеющего разряда (а); фотография квазиодномерной цепочечной структуры (b)

Коллоидная плазма является удобным объектом исследования АБЧ [10–15]. Действительно, в плазме, по сравнению с электролитами, значительно меньшую роль играют химические процессы, что позволяет более точно управлять параметрами эксперимента. Кроме того, низкая вязкость плазмы позволяет использовать слабые источники энергии для возбуждения активного движения и, таким образом, использовать линейный математический формализм. В работе [11] представлены результаты экспериментального исследования параметров активного броуновского движения одиночных микрочастиц под воздействием лазерного излучения в плазме емкостного ВЧ-разряда. Показано, что лазерное излучение является эффективным механизмом индуцирования активности пылевых частиц. Важно отметить, что используемые в эксперименте лазеры небольшой мощности практически не влияют на параметры разряда. Драйвером активного броуновского движения частиц выступает фотофоретическая сила. В работе приведено сравнение движения сферических частиц меламина-формальдегида диаметром $D \approx 10$ мкм с различным типом покрытия. В частности, исследовалось три типа частиц: частицы без покрытия; частицы с однородным тонким медным покрытием; янус-частицы, часть поверхности которых имела железное покрытие (свойства янус-частиц детально описаны в [17]). Как показали исследования [11], характер движения янус-частиц оказался наиболее сложным по сравнению с другими типами исследуемых частиц. Динамика янус-частиц представляла комбинацию орбитального и хаотического движений, в то время как характер движения непокрытых частиц и частиц с однородным покрытием был преимущественно орбитальным в плоскости, параллельной лазерному лучу.

В представленной работе проведено исследование активного броуновского движения пылевых частиц, формирующих квазиодномерные (цепочечные) структуры, содержащие 11 микрочастиц, под действием лазерного излучения. Активное движение частиц индуцировалось лазерным излучением, нагревающим поглощающую поверхность частиц. Сильное взаимодействие заряженных частиц приводило к более сложному поведению наблюдаемых структур. Целью работы являлось исследование формирования цепочечных структур активных броуновских частиц и их динамики под действием лазерного излучения в стратифицированном тлеющем разряде постоянного тока.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ УСТАНОВКА

Схема установки приведена на рис. 1. Эксперимент проводился в вертикально ориентированной газоразрядной стеклянной трубке длиной $l = 1250$ мм и внутренним диаметром $d = 40$ мм. Расстояние между катодом и анодом, расположенными в ответвлениях внизу и вверху трубки, составляло 1050 мм. Нижний конец трубки был запаян, а верхняя часть была подключена к системе контроля давления, там же располагался инжектор пылевых частиц. Трубка откачивалась с помощью турбомолекулярного насоса и заполнялась инертным газом аргоном до рабочего давления $P = 7.5$ Па, после чего с использованием источника питания Spellman между анодом и катодом зажигался разряд постоянного тока. Сила тока составляла $i = 0.75$ мА при напряжении $U = 1.6$ кВ. В ходе эксперимента в трубку непрерывно подавался плазмообразующий газ со скоростью 2 стандартных см³/мин, что позволяло поддерживать неизменными свойства плазмы.

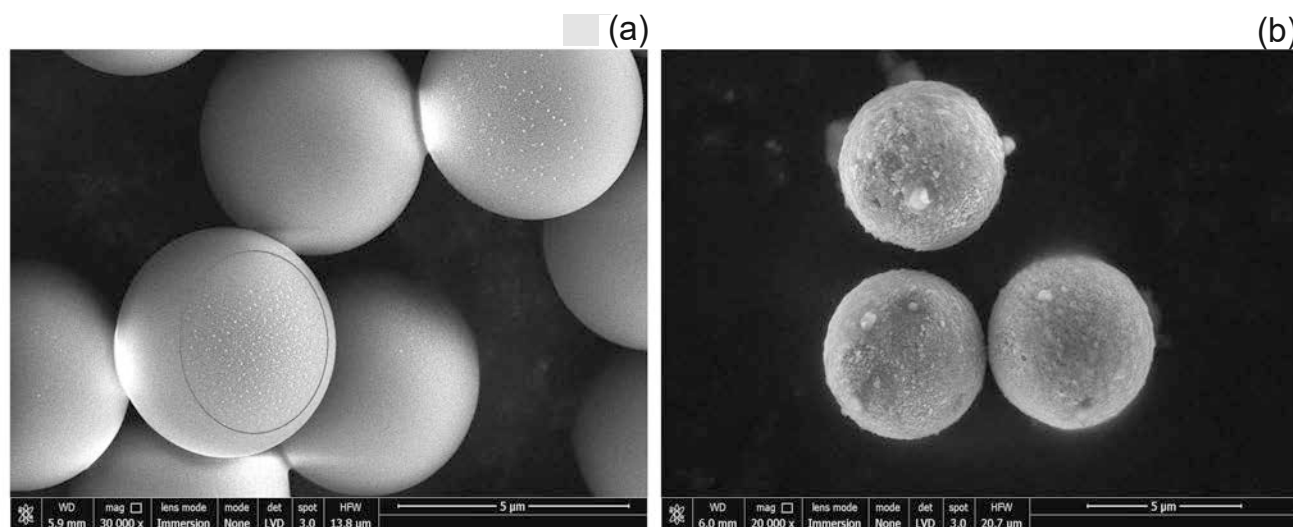


Рис. 2. РЭМ-изображения сферических монодисперсных частиц меламина-формальдегида диаметром 5 мкм: *a* — частицы с однородным медным покрытием; *b* — янус-частицы

Пылевые частицы инжестировались в разрядную камеру с помощью магнитного воздействия (встряхивания) одного из двух контейнеров, содержащих частицы различного типа. Использовались два типа сферических монодисперсных частиц диаметром $D \approx 5$ мкм: меламина-формальдегид, полностью покрытый медью, и янус-частицы (с частичным медным покрытием). Использование двух независимых контейнеров позволило проводить эксперименты с различными микрочастицами, сохраняя неизменными параметры разряда. После инъекции частицы падали в область положительного столба разряда, где происходила их зарядка и захват в областях повышенной ионизации — стратах. Для стабилизации положения страт была использована диэлектрическая конусообразная вставка, концентрирующая поток электронов и ионов по оси трубки.

Источником энергии активного броуновского движения частиц являлся твердотельный лазер с длиной волны 532 нм, мощность которого можно было варьировать. С помощью системы оптических линз лазерный луч был расширен до диаметра 10 мм и направлен таким образом, чтобы он полностью покрывал зону движения частиц и при этом был перпендикулярен оси трубки. Этот же лазер использовался для визуализации пылевой структуры.

Движение пылевых частиц фиксировалось высокоскоростной видеокамерой. Частота записи составляла 400 кадров в секунду при разрешении 512×512 пикселей (19.6 мкм/пиксель). Полученные данные обрабатывались при помощи специализированных компьютерных программ [13, 18, 19].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ НАБЛЮДЕНИЙ

3.1. Материалы

Как упоминалось выше, в эксперименте использовались следующие типы монодисперсных сферических меламина-формальдегидных частиц диаметром $D \approx 5$ мкм: частицы с однородным тонким медным покрытием; частицы с частичным медным покрытием (янус-частицы). Изображения частиц, полученные с помощью растрового электронного микроскопа (РЭМ), представлены на рис. 2. Частицы с медным покрытием произведены фирмой MicroParticles GmbH (Berlin, Germany), в то время как янус-частицы были изготовлены по технологии, описанной в [20].

3.2. Баланс сил

Рассмотрим силы, действующие на пылевые частицы в исследуемой разрядной плазме. Как показано в [15], динамика одиночных пылевых частиц в тлеющем разряде определяется следующими силами: силой гравитации F_g ; кулоновской силой со стороны электрического поля разряда F_E ; силами ионного и нейтрального увлечения F_{id} , F_{nd} ; фотофоретической силой F_f . Состояние равновесия обеспечивалось тремя силами F_g , F_E , F_{id} .

В нашем случае к указанным силам добавляются силы взаимодействия между частицами в квазиоднормерной цепочке [21–23]. Считается, что заряженная пылевая частица в тлеющем разряде формирует конфигурацию ионного потока, содержащего ионный фокус. Параметры ионного фокуса определяются в первую очередь зарядом частиц.

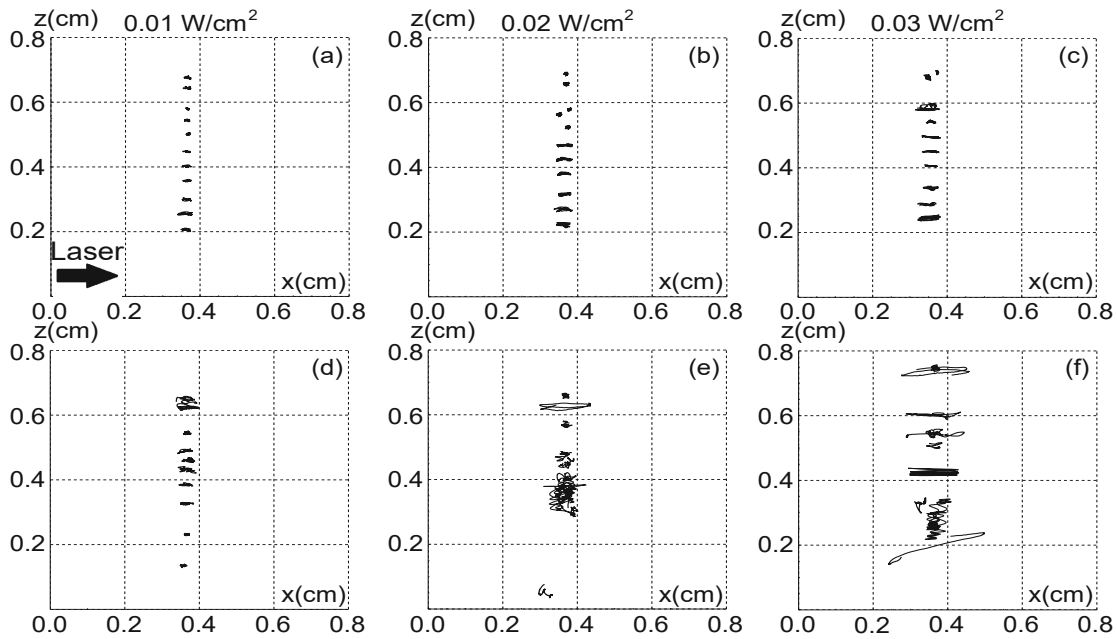


Рис. 3. Траектории частиц в цепочечной структуре в страте тлеющего разряда за промежуток времени $\Delta t = 0.5$ при различной интенсивности лазерного излучения: *a–c* — частицы с покрытием, *d–f* — янус-частицы

В нашем эксперименте частицы имели примерно одинаковую массу m_d и размеры D . Согласно известным моделям [24], величина заряда частицы, погруженной в газовый разряд, зависит от ее радиуса. Следовательно, заряд исследуемых частиц Z можно считать одинаковым. Таким образом, при одинаковых условиях разряда и отсутствии лазерного воздействия плазменно-пылевые структуры двух исследуемых типов (содержащих частицы с однородным покрытием и янус-частицы) обладали примерно одинаковой динамикой. В таком случае нет необходимости точно измерить указанные выше силы, а достаточно обеспечить одинаковые параметры разряда для двух типов используемых частиц.

Рассмотрим теперь силы, определяющие их активное движение. Как показано в работах [11], механизмы активности, выводящие системы плазмы-пылинка из состояния равновесия, основаны на фотофоретических силах. При этом, с одной стороны, фотофорез обеспечивается температурными градиентами на поверхности частиц. В этом случае возникает асимметрия силы нейтрального увлечения. Такой механизм реализуется для всех частиц, используемых в эксперименте. С другой стороны, для янус-частиц возникают дополнительные фотофоретические эффекты, связанные с различием коэффициентов аккомодации на разных участках поверхности частицы.

Градиенты температуры и коэффициентов аккомодации, наряду с вращением частицы вокруг оси, могут создавать нескомпенсированные силы, вызы-

вающие ее активное движение (в частности, возникновение орбитального вращения [25]). Ожидается, что действие фотофоретической силы будет существенно разным для частиц с разным типом поверхности [11]. Янус-частица, освещенная лазерным излучением, может иметь наиболее заметные температурные градиенты на поверхности из-за ее неоднородности. Это приводит к сильным фотофоретическим эффектам, которыми можно управлять посредством изменения интенсивности лазерного излучения, I_L , которая пропорциональна мощности лазера P_L , $P_L \sim I_L$. Отметим, что для частиц с однородной поверхностью фотофорез также является фактором активности [11].

3.3. Формирование структур, динамика пылевых частиц

В процессе эксперимента микрочастицы заданных типов инжестировались в объем разрядной плазмы тока, где в результате баланса рассмотренных сил наблюдалось формирование квазиодномерных (цепочечных) структур (рис. 1*b*). Для возбуждения активного броуновского движения цепочечные структуры облучались лазерным излучением различной интенсивности. Для анализа динамики частиц данные видеосъемки обрабатывались специализированным программным обеспечением, которое позволяло определить координаты частиц x, z , среднеквадратичные смещения $\langle r^2(t) \rangle$ и другие параметры. Траектории движения частиц представлены на рис. 3.

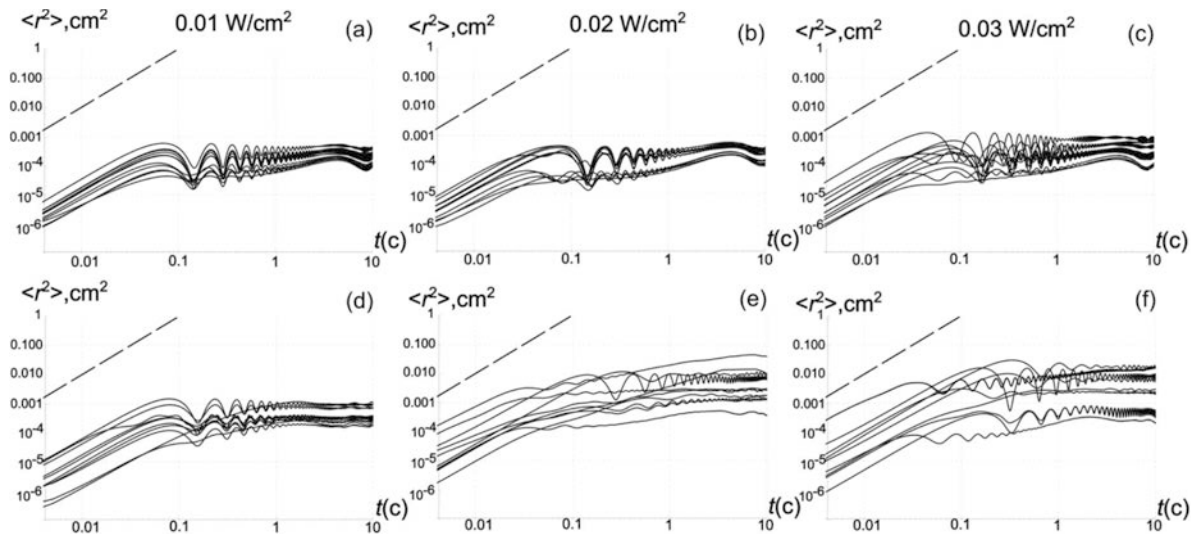


Рис. 4. Среднеквадратичные смещения для пылевых частиц: *a–c* — частицы с покрытием, *d–f* — янус-частицы

Как видно, при минимальной мощности лазера частицы обоих типов формируют продольную цепочечную структуру. Это состояние соответствует минимальной кинетической энергии частиц. Потенциальной энергии межчастичного взаимодействия, которая обусловлена кулоновскими силами и наличием ионного фокуса, достаточно для формирования упорядоченной цепочки. Однако динамика частиц начинает сильно меняться при увеличении интенсивности лазерного излучения. Действительно, покрытые частицы сохраняют цепочечную структуру, несмотря на рост их кинетической энергии (см. рис. 3*a–c*). При этом вертикальное межчастичное расстояние немного уменьшается с увеличением мощности лазера. По-видимому, ионный фокус в рассматриваемом случае является пространственно размытым, что может быть фактором устойчивости цепочки. Структура из янус-частиц под воздействием лазерного излучения деградирует значительно быстрее, хотя и сохраняет некоторые признаки вертикальной цепочки. На наш взгляд, это связано с тем, что кинетическая энергия янус-частиц растет быстрее с ростом интенсивности излучения по сравнению с кинетической энергией частиц с однородным покрытием [15]. Это их свойство можно назвать эффективной теплоемкостью, которая у янус-частиц минимальна в нашей ситуации. Следовательно, при одних и тех же значениях интенсивности лазерного излучения кинетический разогрев цепочки из янус-частиц развивается быстрее, что приводит к ее деградации.

Согласно современным представлениям, за отрицательно заряженными пылевыми макрочастицами в бесстолкновительной плазме формируется ионный фокус [26, 27]. При этом считается, что вторая и по-

следующие макрочастицы, формирующие пылевую цепочку, взаимодействуют как с отрицательно заряженными макрочастицами, так и с положительным ионным фокусом. Такое дипольное приближение кильватерного взаимодействия обычно приводится для объяснения формирования цепочечных пылевых структур, наблюдаемых в лабораторных экспериментах. Однако анализ траекторий микро-частиц в наших экспериментах указывает на необходимость более детального исследования механизма формирования цепочечных структур в тлеющем разряде постоянного тока. Действительно, несмотря на некогерентное движение частиц и их значительное смещение в горизонтальной плоскости, не происходит разрушения цепочечной структуры. Важной характеристикой движения частиц является среднеквадратичное смещение, определяемое по формуле [25]

$$\langle r^2(t) \rangle = \langle [r(t) - r(0)]^2 \rangle, \quad (1)$$

$r(0)$ — вектор начального положения частицы, $r(t)$ — положение частицы в момент времени t . В нашем случае проводилось усреднение по времени $T = 10$ с, графики представлены на рис. 4.

На коротком временном масштабе графики демонстрируют баллистический режим движения с асимптотикой $\sim t^2$ (штриховая линия) для всех частиц. Начиная с момента времени $t \sim 0.1$ с наблюдается режим движения «в ловушке» с определенным периодом (см. подробнее [12], рис. 4*b* при $a = 1$). Так же, как и в [28–31], асимптотик $\sim t^{3/2}$, характерных для активного броуновского движения в классической пространственно-однородной системе (без ловушки) в наших экспериментах не обнаружено (подробнее см. [2]). Из анализа рис. 4 можно оце-

нить степень хаотичности движения частиц в цепочечных структурах. Действительно, при малых интенсивностях лазерного излучения период орбитального вращения всех частиц примерно одинаков. Начальную фазу вращения из рис. 4 определить нельзя. Однако из наблюдений можно сделать вывод, что фазы кругового движения частиц не совпадают (см. рис. 1b). С ростом интенсивности излучения янус-частицы хаотизируются значительно быстрее и в большей степени. Такой характер активности полностью согласуется с результатами, описанными в [15] для одиночных частиц.

Еще одной характеристикой активного броуновского движения является средняя кинетическая энергия частиц [32–34]. На рис. 5 представлена зависимость от I для кинетической энергии частиц, усредненной по времени ($T = 60$ с) и по ансамблю частиц.

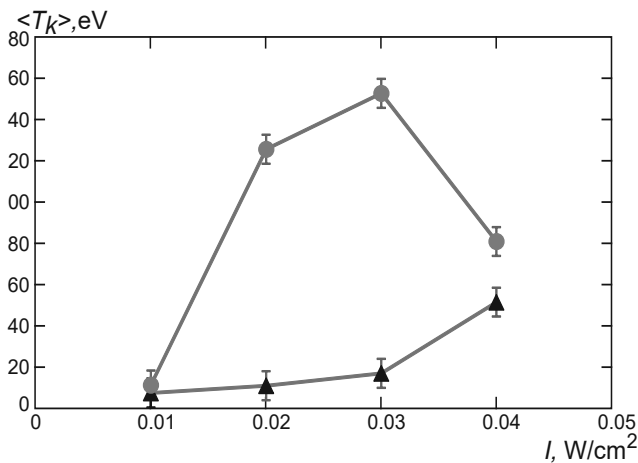


Рис. 5. Зависимость усредненной по времени и по ансамблю кинетической энергии частиц от интенсивности лазерного излучения: треугольники — цепочка из покрытых частиц, кружки — цепочка из янус-частиц

Из рис. 5 видно, что незначительное увеличение интенсивности лазерного излучения приводит к увеличению кинетической энергии частиц на порядок (для покрытых частиц) и более (для янус-частиц). Кинетическая энергия янус-частиц растет значительно быстрее с ростом интенсивности излучения. При этом при плотности мощности 0.04 Вт/см² достигается предельное значение кинетической энергии для двух самых энергичных янус-частиц, которые покидают цепочечную структуру. С этим связано наблюдаемое уменьшение $\langle T_k \rangle$ при $I = 0.04$ Вт/см². Следует отметить, что кинетическая энергия микрочастиц значительно превышает среднюю кинетическую энергию атомов

буферного газа ($T_n \sim 0.03$ эВ), что указывает на активный характер движения.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Впервые экспериментально исследовано активное броуновское движение пылевых частиц в квазиодномерных (цепочечных) структурах в тлеющем разряде постоянного тока под действием лазерного излучения. Исследовались цепочки из частиц с тонким медным покрытием и цепочки из янус-частиц. Все частицы имели одинаковые размеры ($D \approx 5$ мкм) и примерно одинаковые массы и электрические заряды. Эксперименты выполнены при одинаковых параметрах тлеющего разряда постоянного тока $i = 0.75$ мА, $U = 1.6$ кВ в плазмообразующем газе аргоне при $P = 7.5$ Па. На основе анализа траекторий, среднеквадратичных смещений, а также средних кинетических энергий микрочастиц, формирующих структуры, сделан вывод, что рассмотренные частицы являются активными броуновскими.

Экспериментально показано, что характер влияния лазерного излучения на квазиодномерные (цепочечные) структуры зависит от типа частиц, формирующих цепочки. С увеличением интенсивности лазерного излучения в диапазоне от 10^{-2} до $4 \cdot 10^{-2}$ Вт/см² средняя кинетическая энергия пылевых частиц увеличивалась на порядок и более. Все частицы цепочки совершали преимущественно круговое движение около своих положений равновесия в радиальной плоскости. Радиус кругового движения возрастал с ростом интенсивности излучения. Сохранение цепочечной структуры при этом, по-видимому, свидетельствует о пространственной размытости ионного фокуса, который предположительно может являться одним из механизмов формирования цепочек. Для определения механизмов формирования цепочечных структур в тлеющем разряде необходимы дополнительные исследования.

Средняя кинетическая энергия янус-частиц, формирующих цепочечную структуру, возрастала значительно быстрее при увеличении интенсивности лазерного излучения по сравнению со случаем покрытых частиц. За счет этого взаимное положение янус-частиц в цепочке могло изменяться при изменении интенсивности лазерного излучения, а сама цепочка деградировала. При этом некоторые признаки цепочечной структуры сохранялись даже в случае максимальной интенсивности излучения $I = 4 \cdot 10^{-2}$ Вт/см². Отметим, что отдельные янус-частицы покидали область страты при максимальной

мощности лазера. Из-за анизотропии свойств поверхности янус-частиц цепочечная структура, образованная такими частицами, проявляла более сложный характер движения по сравнению со структурой из полностью покрытых частиц.

ЛИТЕРАТУРА

1. И. С. Арансон, *Активные коллоиды*, УФН **183**, 87 (2013) [I. S. Aranson, *Active Colloids*, Phys. Usp. **56**, 79 (2013)].
2. C. Bechinger, R. DiLeonardo, H. Löwen et al., Mod. Phys. **88**, 045006 (2016).
3. A. Einstein, Annalender Physik **322**, 549 (1905).
4. D. Selmeczi, L. Li, L. I. Pedersen et al., Eur. Phys. J. Spec. Top. **157**, 1 (2008).
5. H. C. Berg, Springer Science and Business Media (2008), p. 134.
6. M. E. Cates, Rep. Prog. Phys. **75**, 042601 (2012).
7. S. Sanchez, A. N. Ananth, and V. M. Fomin, J. Amer. Chem. Soc. **133**, 14860 (2011).
8. W. F. Paxton, K. C. Kistler, and C. C. Olmeda, J. Amer. Chem. Soc. **126**, 13424 (2004).
9. J. Li and V. V. Singh, ACS Nano **8**, 11118 (2014).
10. V. Nosenko, F. Luoni, A. Kaouk et al., Phys. Rev. Res. **2**, 033226 (2020).
11. K. Arkar, M. M. Vasiliev, O. F. Petrov et al., Molecules **26**, 561 (2021).
12. I. I. Fairushin, M. M. Vasiliev, and O. F. Petrov, Molecules **26**, 6974 (2021).
13. X. G. Koss, E. A. Kononov, I. I. Lisina et al., Molecules **27**, 1614 (2022).
14. O. F. Petrov, K. B. Statsenko, and M. M. Vasiliev, Sci. Rep. **12**, 8618 (2022).
15. A. S. Svetlov, M. M. Vasiliev, E. A. Kononov et al., Molecules **28**, 1790 (2023).
16. R. F. Ismagilov and A. Schwartz, Angew. Chem. Int. Ed. Engl. (2002), Vol. **41**, pp. 652–654.
17. A. Perro, S. Reculosa, S. Ravaine et al., J. Mater. Chem. **15**, 3745 (2005).
18. F. M. Trukhachev, R. E. Boltnev, A. A. Alekseevskaya et al., Phys. Plasmas **28**, 093701 (2021).
19. F. M. Trukhachev, R. E. Boltnev, A. A. Alekseevskaya et al., Plasma Phys. Rep. **49**, 129 (2023).
20. E. A. Kononov, M. M. Vasiliev, E. V. Vasilieva et al., Nanomaterials **11**, 2931 (2021).
21. О. С. Ваулина, Э. А. Саметов, Е. А. Лисин, ЖЭТФ **158**, 399 (2020).
22. I. I. Lisina, E. A. Lisin, O. S. Vaulina et al., J. Phys.: Conf. Ser. **1147**, 012112 (2019).
23. I. I. Lisina and O. S. Vaulina, Phys. Scripta **89**, 105604 (2014).
24. J. E. Allen, Phys. Scripta **45**, 497 (1992).
25. J. Eymeren and G. Wurm, Mon. Not. Roy. Astron. Soc. **420**, 183 (2012).
26. M. Lampe, G. Joyce, G. Ganguli et al., Phys. Plasmas **7**, 3851 (2000).
27. I. H. Hutchinson, Phys. Rev. E **85**, 066409 (2012).
28. M. M. Vasiliev, O. F. Petrov, A. A. Alekseevskaya et al., Molecules **25**, 3375 (2020).
29. S. Jahanshahi, H. Lowen, and B. Hagen, Phys. Rev. E **95**, 022606 (2017).
30. H. Qian, M. P. Sheetz, and E. L. Elson, Biophys. J. **60**, 910 (1991).
31. H. Löwen, J. Phys. Cond. Matt. **21**, 474203 (2009).
32. В. Е. Фортов, А. Г. Храпак, С. А. Храпак и др., *Пылевая плазма*, УФН **174**, 495 (2004).
33. В. Е. Фортов, Г. Е. Морфилл, *Комплексная и пылевая плазма. Из лаборатории в космос*, Физматлит, Москва (2012).
34. О. Ф. Петров, М. М. Васильев, Йе Тун и др. ЖЭТФ **147**, 372 (2015).

ФОРМИРОВАНИЕ ФАНТОМНЫХ ИЗОБРАЖЕНИЙ В ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКОМ ЭНДОСКОПЕ НА ОСНОВЕ РАССЕЯНИЯ СВЕТА

Д. П. Агапов^{}, И. В. Беловолов, С. А. Магницкий, Д. Н. Фроловцев, А. С. Чиркин*

*Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, физический факультет
119991, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 27 июня 2023 г.,
после переработки 10 июля 2023 г.
Принята к публикации 10 июля 2023 г.

Экспериментально продемонстрирована возможность получения изображения объекта с помощью волоконно-оптического эндоскопа с применением принципа фантомных изображений. Эндоскоп состоит из многомодового волокна и включает в себя источник излучения с тепловой статистикой, которое формируется при случайной модуляции излучения He–Ne-лазера с помощью фазового пространственного модулятора света. Показано, что после прохождения волокна поле сохраняет псевдотепловую статистику. Полученное таким образом излучение использовано для формирования фантомных изображений как в прошедшем, так и в рассеянном свете.

DOI: 10.31857/S0044451023110032

EDN: PNCCLC

1. ВВЕДЕНИЕ

Процесс получения фантомных изображений (ФИ) отличается от наблюдения традиционных изображений, основанных на измерении пространственного распределения средней интенсивности отраженного или рассеянного от объекта излучения. В фантомной визуализации изображение получают опосредованно. Характерной чертой метода ФИ является использование взаимной корреляционной функции интенсивностей излучения объектного и опорного пучков для извлечения информации о свойствах объекта (например, модуля коэффициента пропускания [1]). Объектным пучком называют часть излучения, которая после взаимодействия с объектом регистрируется собирающим детектором (bucket-detector), не обладающим пространственным разрешением, т. е. излучение интегрально детектируется по всей апертуре пучка после взаимодействия с объектом. Опорный, или восстанавливающий пучок представляет собой не взаимодействующую с объектом часть излучения, которая регистрируется детектором с простран-

ственным разрешением (например, при помощи ПЗС-матрицы или сканирующего детектора).

Для получения ФИ необходимо наличие корреляции между пространственными распределениями интенсивностей в плоскости объекта и в сопряженной плоскости в опорном пучке. По существу, в основе метода ФИ лежит принцип работы интерферометра интенсивностей [2]. В фантомной визуализации используются классические или квантовые поля с тепловой статистикой. Энтропия таких полей, как известно, существенно больше, чем у когерентного излучения, и поэтому количество информации, которое может содержаться в таком свете, в принципе, существенно больше. С этой точки зрения задача фантомной визуализации состоит в нахождении способов извлечения информации о свойствах объекта исходя из статистических свойств световых полей.

В первых работах по ФИ использовались источники излучения на основе спонтанного параметрического рассеяния света [3, 4]. В этом случае пространственные корреляции опорного и объектного пучков имеют квантовую природу, и их описание проводится с использованием аппарата квантовой механики. Впоследствии принцип ФИ был распространен на источники излучения, в которых корреляции интенсивностей имеют классическую природу [5, 6]. В этих случаях излучение с тепловой стати-

^{*} E-mail: dimaagapov@mail.ru

стикой получают при помощи рассеяния когерентного излучения на вращающемся матовом диске [5] или в жидких кристаллах [7]. В целом же схемы наблюдения классических и квантовых ФИ аналогичны, различие может состоять в методах извлечения информации об объекте и его качестве.

Дальнейшим развитием обсуждаемого принципа визуализации, с точки зрения используемых источников излучения, явился метод, названный вычислительными ФИ [8]. В таких схемах вычисляемая корреляционная функция интенсивности аналогична предыдущим случаям, как и извлекаемая из нее информация. Однако случайное поле формируют с помощью управляемого пространственного модулятора света.

Интерес к развитию принципа фантомной оптики стимулируется возможностью получения ФИ в различных частотных диапазонах, а также распространением принципа ФИ на поляризационные и временные свойства объекта. Так, ФИ получены в рентгеновском [9, 10] и терагерцевом диапазонах [11, 12]. Кроме того, принцип ФИ обобщен на акустические волны в ультразвуковом диапазоне [13]. С использованием в качестве источника корреляций запутанных состояний сверххолодных атомов гелия [14] тоже можно получать ФИ. В течение последних нескольких лет разработана и реализована концепция фантомной поляриметрии в классическом [15, 16] и квантовом [17, 18] случаях. Универсальность метода ФИ свидетельствует о возможности его применения во множестве приложений.

В настоящей работе приведены результаты исследований, являющихся дальнейшим развитием идеи вычислительных ФИ на элементной базе волоконной оптики. Это направление — волоконная фантомная оптика (ВФО) — является новым и в настоящее время находится на начальной стадии развития. ВФО находится на стыке волоконной и статистической оптики, оптики ФИ и интеллектуальных систем формирования и обработки изображений.

К настоящему времени в ВФО можно выделить два основных направления — это волоконная фантомная визуализация [19] и временные фантомные «изображения» в волокне [20]. В дальнейшем речь пойдет о волоконной фантомной визуализации. В экспериментальных системах ВФО для создания световых шаблонов используется ряд источников излучения. Так, в работе [21] предложен источник на основе массива многомодовых волокон, к каждому из которых подключен свой волоконный фазовый модулятор света. Подобная система экспериментально реализована в работах [22, 23]. Однако эта

система работала только в режиме «на просвет», т. е. регистрировалось излучение, прошедшее через объект. В качестве другого типа источников можно выделить системы, состоящие из матрицы микрозеркал и многомодового оптического волокна (ОВ). В работах [24, 25] такой источник использовался для передачи изображения через многомодовое ОВ, при этом система также работала в режиме «на просвет». В работе [26] реализована однопиксельная визуализация, однако сигнал с объекта представлял собой сигнал флюоресценции. Наконец, рассмотрим еще один источник, который состоит из фазового пространственного модулятора света (space light modulator, SLM) и многомодового ОВ. В работе [27] предложена визуализация через ОВ, а в [28] получены ФИ в режиме «на просвет» с использованием источника, выполненного на основе SLM и ОВ. Что касается рассеивающих объектов, то в литературе имеются сообщения о применении метода ФИ для исследования структуры таких объектов [29, 30]. Встречается также информация о результатах использования волоконных зондов для интегрального сбора рассеянного излучения [31]. Отдельно стоит выделить направление, в котором предполагается формирование трехмерных изображений в ВФО [32]. Однако сообщения о системах, использующих эти подходы совместно с волоконным источником теплового излучения, отсутствуют.

В предлагаемой работе, насколько нам известно, впервые получены ФИ от объектов в рассеянном свете в многомодовом волоконно-оптическом эндоскопе. Случайное поле с тепловой статистикой формировалось за счет модуляции когерентного излучения с помощью SLM. Представлены также результаты получения ФИ на созданном лабораторном макете эндоскопа в режиме «на просвет».

Статья построена следующим образом. В разд. 2 изложен принцип получения ФИ в случайном классическом поле при дискретной обработке изображения. Раздел 3 посвящен описанию псевдотеплового источника излучения и его статистических характеристик. В разд. 4 представлены экспериментальные результаты по фантомной визуализации объектов в прошедшем и рассеянном свете. В заключительном разделе анализируются результаты и отмечено направление дальнейших экспериментов по волоконно-оптической эндоскопии с неклассическим источником света.

2. ОПИСАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ ФИ В КЛАССИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Как отмечалось выше, формирование ФИ с использованием статистических свойств классических световых полей основано на измерении взаимной пространственной корреляционной функции интенсивностей в объектном и опорном пучках. В рамках дискретного описания процесса задача сводится к проблеме восстановления оптического изображения из корреляционной функции вида

$$G_{i,j} = \langle \tilde{I}_{i,j} \tilde{I}_B \rangle - \langle \tilde{I}_{i,j} \rangle \langle \tilde{I}_B \rangle. \quad (1)$$

Здесь $\tilde{I}_{i,j}$ — регистрируемая за время экспозиции интенсивность света, поступающая на виртуальный пиксель объекта с номерами i и j вдоль ортогональных координат,

$$\tilde{I}_B = \sum_{k,m} R_{k,m} \tilde{I}_{k,m}$$

— прошедшая через объект или рассеянная объектом суммарная за время экспозиции интенсивность света, регистрируемая однопиксельным (интегрирующим) детектором, $R_{k,m}$ — коэффициент рассеяния от виртуального пикселя объекта с координатами k, m ; угловые скобки означают усреднение по снимкам (по паттернам). Под виртуальным пикселем подразумевается один из пикселей при мысленном разбиении плоскости объекта на число пикселей ПЗС-камеры, используемой в канале регистрации опорного пучка.

Подстановка в (1) выражений для интенсивностей дает

$$G_{i,j} = R_{i,j} \langle (\tilde{I}_{i,j})^2 \rangle + \sum_{k,m \neq i,j} \langle R_{k,m} \tilde{I}_{i,j} \tilde{I}_{k,m} \rangle - R_{i,j} \langle \tilde{I}_{i,j} \rangle^2 - \langle \tilde{I}_{i,j} \rangle \sum_{k,m \neq i,j} \langle R_{k,m} \tilde{I}_{k,m} \rangle. \quad (2)$$

Если случайно модулированный по поперечному сечению световой пучок имеет радиус корреляции меньший, чем размер виртуального пикселя, то

$$\langle \tilde{I}_{i,j} \tilde{I}_{k,m} \rangle = \langle \tilde{I}_{i,j} \rangle \langle \tilde{I}_{k,m} \rangle$$

и взаимная корреляционная функция (2) принимает вид

$$G_{i,j} = R_{i,j} \langle \tilde{I}_{i,j}^2 \rangle - R_{i,j} \langle \tilde{I}_{i,j} \rangle^2 = R_{i,j} \left(\langle \tilde{I}_{i,j}^2 \rangle - \langle \tilde{I}_{i,j} \rangle^2 \right). \quad (3)$$

Ее можно записать следующим образом:

$$G_{i,j} = R_{i,j} D_{i,j}, \quad (4)$$

где

$$D_{i,j} = \langle \tilde{I}_{i,j}^2 \rangle - \langle \tilde{I}_{i,j} \rangle^2$$

— дисперсия интенсивности света, освещающего (i, j) -й виртуальный пиксель на поверхности объекта, взятая в течение времени экспозиции τ . В случае наблюдения объекта на просвет вместо коэффициентов отражения $R_{i,j}$ в выражении (4) будут стоять коэффициенты пропускания $T_{i,j}$.

При облучении объекта светом с одинаковой по всей плоскости объекта дисперсией интенсивности ($D_{i,j} = D_0 = \text{const}$) выражение (4) можно пронормировать, проведя калибровочное измерение при отсутствии объекта. Тогда нормированная функция

$$g_{i,j} = G_{i,j} / G_0$$

определяет коэффициент рассеяния

$$g_{i,j} = R_{i,j}. \quad (5)$$

Следует обратить внимание на важную особенность соотношения (4). Абсолютное значение взаимной корреляционной функции $G_{i,j}$ оказывается пропорциональным дисперсии флуктуирующей от реализации к реализации интенсивности $\tilde{I}_{i,j}$. При дискретном подходе наблюдения ФИ важным является наличие ненулевой дисперсии интенсивности.

3. ИСТОЧНИК ИЗЛУЧЕНИЯ В ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКОМ ЭНДОСКОПЕ

Схема стенда для изучения статистических свойств источника излучения изображена на рис. 1.

Источником излучения выступает He–Ne-лазер, работающий в непрерывном режиме на длине волны 632 нм. После прохождения через расширитель лазерный пучок поступает на SLM, с помощью которого создается излучение с псевдотепловой статистикой [33]. Затем излучение заводится в многомодовое ОВ. При этом расстояние от SLM до объ-

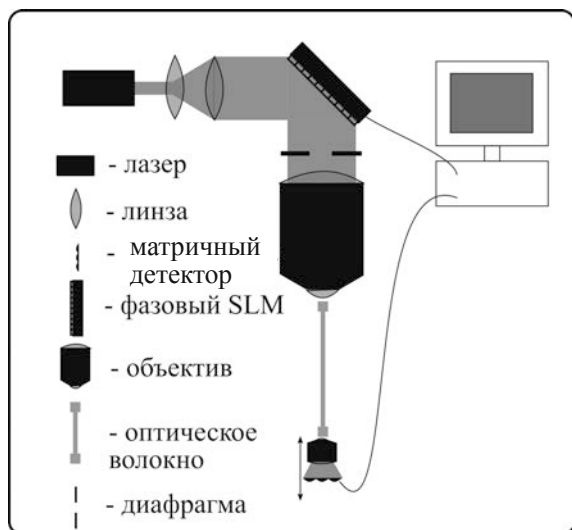


Рис. 1. (В цвете онлайн) Схема установки для изучения статистических свойств источника излучения волоконно-оптического эндоскопа. Лазерный пучок попадает на пространственный модулятор света, рассеивается и заводится в оптическое волокно

ектива выбрано таким образом, что на торец ОВ поступает излучение с радиусом корреляции около 2.1 мкм. Использовалось градиентное многомодовое ОВ с диаметром сердцевины 62.5 мкм и длиной 10 см. На этапе калибровки требуется получить распределение интенсивности в плоскости объекта в зависимости от распределения фазы на SLM. Для этого на выходе из волокна устанавливался объектив ЛОМО 40х/0.95, передающий изображение из области вблизи торца ОВ на камеру Thorlabs C1285R12M с увеличением 25.5 раз. Камера и объектив установлены на подвижной платформе с микрометрическим винтом. Для различных положений платформы с камерой и объективом снималось пространственное распределение интенсивности (спекл-структура) при различных расстояниях от выходного торца волокна до объектива.

Пространственный профиль фазы лазерного излучения модулировался с помощью пространственного модулятора света SLM-100 фирмы Santeс с разрешением 1440×1050 пикселей. Модулятор является 10-разрядным, т.е. каждый пиксель имеет 1024 градации возможной фазовой задержки. Управление SLM осуществлялось персональным компьютером с использованием библиотеки OpenCV на языке Python. Чтобы получить случайную фазовую модуляцию лазерного пучка, программа генерирует случайный массив чисел в диапазоне от 0 до 1023, который затем выводится на матрицу фазового модулятора. При этом диапазон полностью обеспечивает вносимые фазовые задержки в интервале от 0

до 2π радиан. Типичный вид двумерного пространственного распределения фазы приведен на рис. 2.

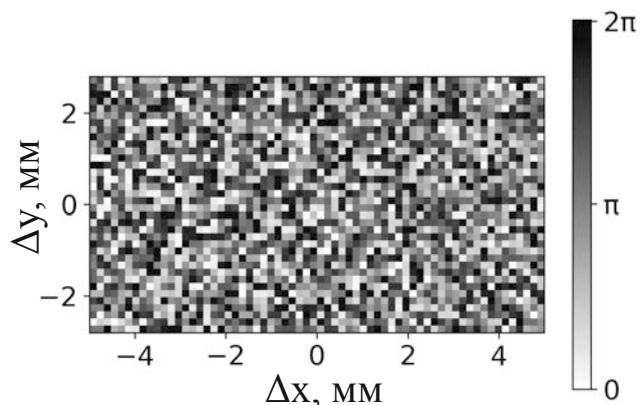


Рис. 2. Реализация распределения фазы на шаблоне пространственного модулятора света (на SLM)

Для получения фантомных изображений чрезвычайно важными являются статистические свойства используемого света. Для их изучения проводилась съемка серии кадров пространственного распределения интенсивности поля в плоскости объекта (рис. 3а) при различных пространственных распределениях фазы на SLM, а затем проводились вычисления. В профиле пучка случайно выбиралось несколько пикселей. Для всех возможных пар выбранных пикселей, а также для каждого пикселя по отдельности вычислялось значение корреляционной функции $g^{(2)}$. Для этого набор из $N = 1000$ спекл-структур оцифровывался и обрабатывался согласно следующему алгоритму. Пусть $I_n(i, j)$ — интенсивность в (i, j) -м пикселе, $I_n(l, m)$ — интенсивность в (l, m) -м пикселе, где n — номер реализации (шаблона). Взаимная корреляционная функция находилась по формуле

$$g^{(2)}(i, j; l, m) = \frac{N \sum_{n=1}^N I_n(i, j) I_n(l, m)}{\sum_{n=1}^N I_n(i, j) \sum_{n=1}^N I_n(l, m)}. \quad (6)$$

Полученные значения корреляционной функции затем усреднялись. Более подробно об исследовании статистических свойств излучения, получаемого с помощью фазового SLM, можно узнать в нашей работе [33], где показано, в частности, что получаемое при этом поле имеет тепловую статистику.

Корреляционная функция интенсивности, вычисленная с помощью программы [34], приведена на рис. 3б. Из неё определялись радиусы корреляции в ортогональных направлениях.

В эксперименте были измерены зависимости радиусов корреляции от расстояния между выходным

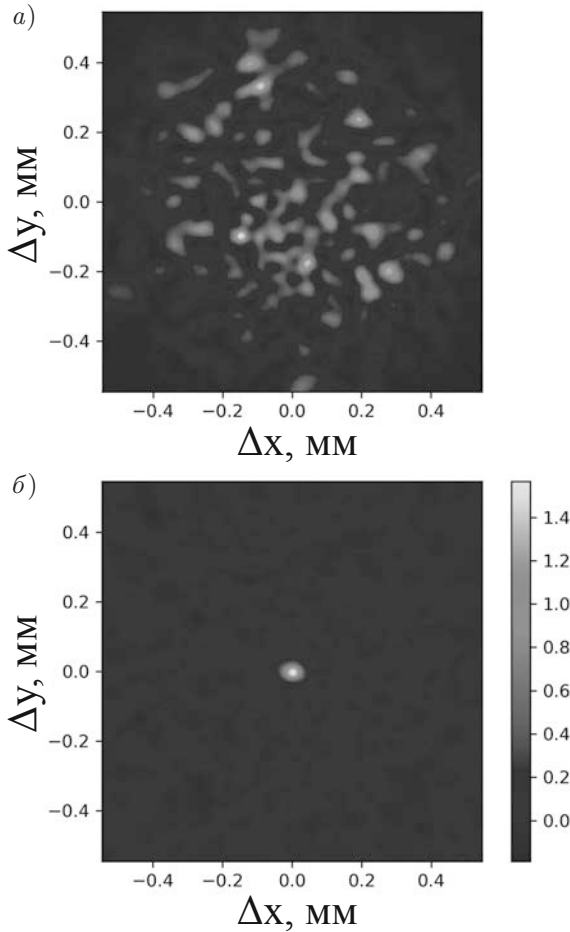


Рис. 3. (В цвете онлайн) Спекл-структура на выходе ОБ на расстоянии 2 мм от торца (а) и вычисленная для нее корреляционная функция интенсивности (б)

торцом волокна и плоскостью наблюдения. Экспериментальные результаты представлены на рис. 4а.

На рис. 4а также представлены данные численного моделирования процессов формирования поля случайной фазовой модуляцией на SLM и его распространения в ступенчатом ОБ (см. Теоретическая кривая). Моделирование проводилось на языке Python, написана библиотека `lightprop2d` [34] и доработана библиотека `pyMMF` [35]. В результате моделирования были получены спекл-картины (см. рис. 3). Для них также рассчитывались корреляционные функции и зависимости радиусов корреляций от расстояния до выхода ОБ, которые представлены на рис. 4а. Из графиков видно, что радиус корреляции с увеличением расстояния от торца ОБ растет, что находится в полном согласии с предсказанием теоремы Ван Циттерта – Цернике [2]. Причины небольшого отклонения связаны с тем фактом, что радиус корреляции на выходе волокна зависит от реального углового спектра излучения, заводимого

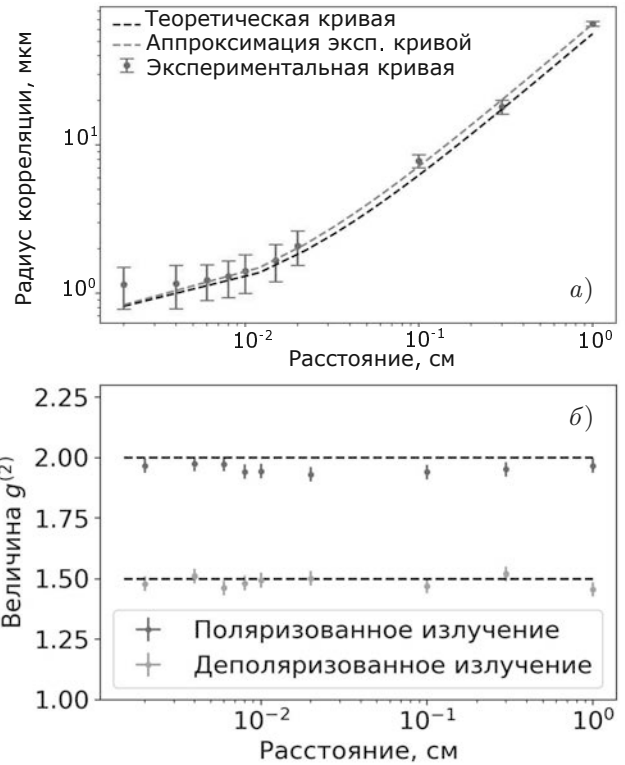


Рис. 4. (В цвете онлайн) а) Зависимость радиуса корреляций от расстояния до выходного торца волокна. б) Зависимость величины $g^{(2)}$ от расстояния до выходного торца волокна.

в ОБ, который сложно контролировать при проведении эксперимента.

Экспериментальные данные позволили также рассчитать параметр $g^{(2)}(0) = g^{(2)}(i, j; i, j)$, характеризующий статистику поля (см. выражение (2)). Полученные значения $g^{(2)}(0)$ в зависимости от расстояния до выходного торца волокна показаны на рис. 4б). Для сравнения результатов на этом же рисунке представлена зависимость $g^{(2)}(0)$ для случая, когда после волокна установлен пленочный поляризатор. Получены значения $g^{(2)}(0) \approx 1.5$ для неполяризованного света и $g^{(2)}(0) \approx 2$ для поляризованного, что убедительно свидетельствует о тепловой, гауссовской статистике интенсивности прошедшего через волокно света. Отличие представленной на рисунке зависимости параметра $g^{(2)}$ от двойки связано с тем, что часть неполяризованного излучения проходила сквозь пленочный поляризатор.

Таким образом, можно сделать вывод, что разработанный тип волоконных источников на основе фазового SLM можно использовать для получения полей с тепловой статистикой, что важно в системах ВФО.

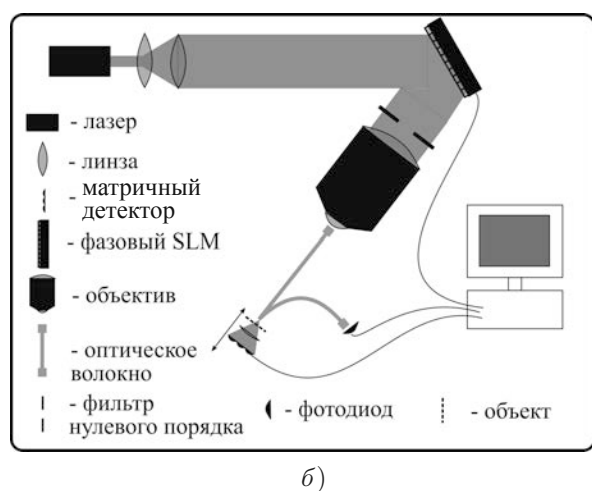
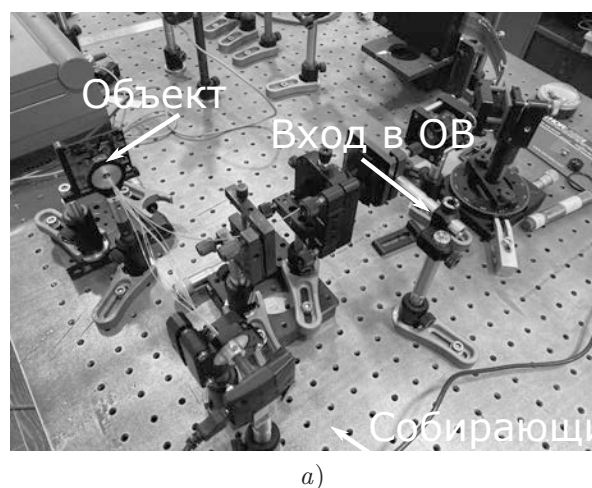


Рис. 5. (В цвете онлайн) Фотография лабораторного макета-прототипа волоконного эндоскопа (а) и его схема (б) (ср. с рис. 1)

4. ФОРМИРОВАНИЕ ВОЛОКОННЫХ ФИ ОБЪЕКТОВ В ПРОШЕДШЕМ И РАССЕЯННОМ СВЕТЕ

В данном разделе описано получение вычислительных ФИ объекта как в прошедшем, так и в рассеянном свете. На рис. 5 представлены фотография и схема установки для получения амплитудных ФИ.

Пространственно-некогерентный свет, формируемый описанным выше источником, облучает объект исследования. В зависимости от режима работы (в рассеянном свете или на просвет) в схеме осуществлялись модификации.

Визуализация объекта при облучении на просвет. В этом режиме в качестве объекта использовалась мишень, представляющая собой набор щелей разной ширины. Сначала проводилась калибровка установки. Получение ФИ в проходящем свете имело в значительной мере тестовый характер. При помощи микрометрической подвижной платформы си-

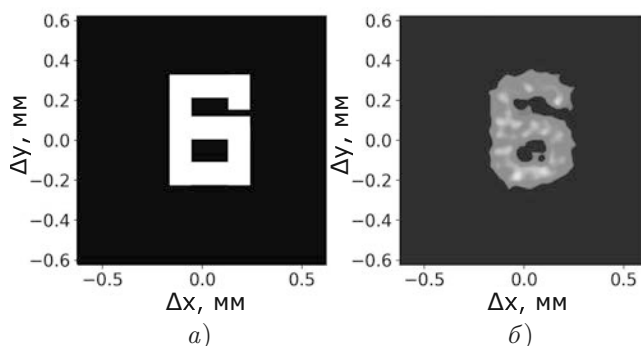


Рис. 6. (В цвете онлайн) Исходный объект (а) и его фантомная визуализация (б) в прошедшем свете на расстоянии 3 мм от торца волокна

стема камера-линза наводилась на рабочую плоскость (плоскость, где ожидается объект). Для выбранной плоскости и фиксированной последовательности случайных шаблонов, подаваемых на SLM, снималась серия снимков, представляющих собой распределение поля после выхода из ОВ. Затем в рабочую плоскость устанавливался объект, камера переводилась в интегральный режим (осуществлялось суммирование сигнала со всех пикселей). Для той же последовательности распределений фазы на SLM, которая использовалась при калибровке, записывались значения интегральных интенсивностей прошедшего через объект излучения. По этим данным вычислялась взаимная пространственная корреляционная функция (1) между полученными при калибровке спекл-картинами и интегральной интенсивностью, прошедшего через объект излучения. Вычислялась также корреляционная функция в отсутствие объекта, что необходимо для нормировки. В каждой точке определялось отношение двух вычисленных значений. Согласно (1), полученный результат дает распределение квадрата модуля коэффициента пропускания объекта. Типичные ФИ объекта, расположенного на расстоянии 3 мм от выходного торца волокна, представлены на рис. 6.

Визуализация при рассеянии света от объекта. Рассеянное объектом назад излучение имеет значительно большую угловую расходимость, чем при наблюдении на просвет. Поэтому возникает необходимость сбора рассеянного излучения в плоскости, расположенной как можно более близко к объекту. Для этого в схему добавлялся специальный зонд, в центре которого находилось описанное ранее ОВ, а вокруг него располагались семь многомодовых волокон, работающих на полном внутреннем отражении, каждое диаметром 400 мкм. Они предназначены для сбора рассеянного объектом излучения в направлении подводящего ОВ. В таком волокон-

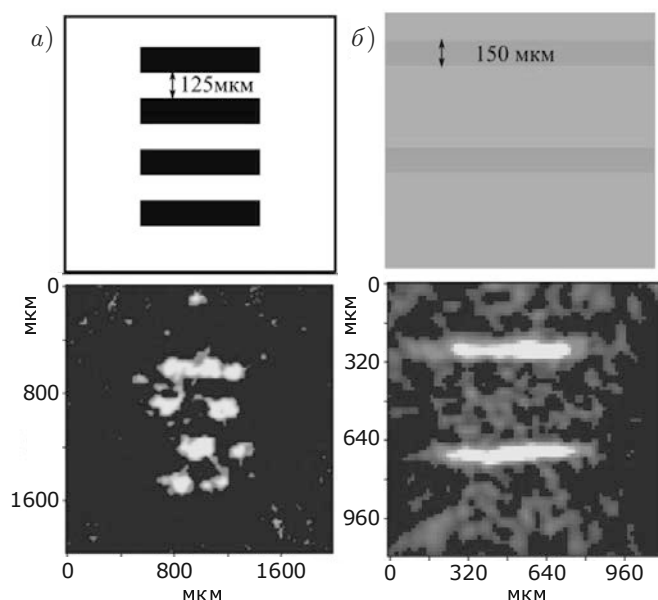


Рис. 7. (В цвете онлайн) Экспериментально полученные ФИ *а)* отражающего объекта (мира) и *б)* рассеивающего объекта (медные проволоки). На верхних рисунках схематично изображена структура объектов, а на нижних — их ФИ, полученные в рассеянном свете

ном зонде собирающие ОВ расположены сбоку от подводящего волокна. На выходе собирающих ОВ располагался суммирующий детектор.

Процедура получения ФИ в рассеянном свете полностью аналогична вышеописанной с той разницей, что интегральное детектирование происходит на выходе собирающих ОВ, а не установленным за объектом детектором. В экспериментах получены ФИ двух типов рассеивающих объектов: миры и двух медных проволок диаметром 150 мкм на фоне белой бумаги. Оба объекта устанавливались на расстоянии 2 мм от выходного торца подводящего ОВ. Восстановленные распределения сечений рассеяния назад (ФИ рассеивающих объектов) приведены на рис. 7.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что с помощью методов ВФО можно восстанавливать структуру объектов в рассеянном свете. Обратим внимание на то, что ФИ миры в рассеянном свете являются светлыми участками, не пропускающими излучение, в то время как в полученных на просвет ФИ они будут темными.

5. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Полученные нами при исследовании результаты показали возможность применения системы «фазо-

вый SLM + многомодовое волокно» для формирования случайных псевдотепловых световых полей, что подтверждается данными для параметра $g^{(2)}$ (см. рис. 4б). Для таких полей в случае поляризованного излучения параметр $g^{(2)} = 2$. Экспериментальное значение близко к этой величине, что свидетельствует о гауссовой статистике излучения. Небольшое отличие $g^{(2)}$ от 2.0, может быть связано с вкладом в рассеянный SLM свет не только от случайно модулируемой части излучения, т. е. при отражении излучения от вносящих случайную фазовую задержку пикселей, но и от лазерного излучения, отраженного от промежутков между пикселями [33].

На рис. 4а показаны экспериментальная и теоретическая зависимости радиусов корреляции от расстояния до выходного торца волокна. Виден одинаковый характер изменения радиуса корреляции в зависимости от расстояния, но экспериментальные значения примерно в 1.8 раза больше теоретических. Это связано, по нашему мнению, с тем, что при моделировании поля на входе ОВ использовалось приближение дельта-коррелированного поля с тепловой статистикой, в то время как в реальности радиус корреляции конечен. Это приводит к тому, что на выходном торце волокна рассчитанный в результате моделирования радиус корреляции составлял 2.0 мкм, в то время экспериментальное значение 2.3 мкм. Величина радиуса корреляции играет ключевую роль с точки зрения качества ФИ. В работе [36] показано, что предельное разрешение в фантомной визуализации определяется величиной радиуса корреляции используемого излучения. Таким образом, чем ближе к волокну находится объект, тем лучше разрешающая способность предлагаемой схемы. Также следует заметить, что в эксперименте при подаче на вход ОВ когерентного излучения на выходе имела бы статическая, «замороженная» картина неоднородностей поля.

Созданный источник пространственно-некогерентного излучения использован для получения ФИ как в проходящем, так и в рассеянном свете. Рассеивающие объекты были с принципиально разными свойствами: отражающие и диффузно рассеивающие. Работающая на отражение мира (рис. 7а) с шириной штрихов 125 мкм восстанавливалась фрагментарно. Это обусловлено тем, что диаграмма направленности рассеяния у таких объектов является узкой, а в используемом нами зонде собирающие волокна располагались сбоку от подводящего волокна. Кроме того, волокна упакованы не оптимальным способом, что приводит к потере излучения от некоторых участков объекта. ешающий

С другой стороны, как можно видеть на рис. 7, для объекта с широкой диаграммой рассеяния, такого как медная проволока на фоне белой бумаги, данный эффект проявляется существенно слабее и изображение восстанавливается лучше.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Отметим основные результаты изложенных в работе исследований. Экспериментально подтверждено, что тепловая статистика поля, полученного при случайной фазовой модуляции когерентного излучения, сохраняется при распространении через многомодовое ОВ.

Продemonстрировано, что созданный на фантомном принципе макет волоконного эндоскопа позволяет получать ФИ как в прошедшем, так и в рассеянном свете. Последнее является наиболее важным результатом выполненных исследований.

Таким образом, в настоящей работе впервые проведено комплексное исследование устройства, которое может лечь в основу практической реализации волоконно-оптического эндоскопа на фантомном принципе, допускающего для восстановления изображения объекта использовать слабоинтенсивный свет и пространственно-неразрешающий изображение детектор.

Предложенный в работе принцип можно обобщить и на случай квантового источника света с коррелированными одиночными фотонами, генерируемыми при спонтанном параметрическом рассеянии.

Благодарности. Авторы благодарят П. П. Гостева за помощь в разработке программного обеспечения для численных расчетов.

Финансирование. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 21-12-00155).

ЛИТЕРАТУРА

1. N. Bornman, M. Agnew, F. Zhu et al., npj Quantum Inf. **5**, 63 (2019).
2. С. А. Ахманов, Ю. Е. Дьяков, А. С. Чиркин, *Введение в статистическую радиофизику и оптику*, Наука, Москва (1981).
3. Д. Н. Клышко, ЖЭТФ **94**(6), 82 (1988).
4. T. B. Pittman, Y. Shih, D. V. Strekalov et al., Phys. Rev. A **52**, R3429 (1995).
5. J. H. Shapiro and R. W. Boyd, Quantum Inf. Process (2012), DOI 10.1007/s11128-011-0356-5.
6. F. Wang, L. Liu, P. Yu et al., Sci. Rep. **6**, 24703 (2016).
7. N. Davletshin, D. Ikonnikov, V. Sutormin et al., Opt. Lett. **47**, 9 (2022).
8. Z. H. Xu, W. Chen, J. Penuelas et al., Opt. Express **26**, 2427 (2018).
9. H. Yu, R. Lu, S. Han et al., **117**, 113901 (2016).
10. D. Pelliccia, A. Rack, M. Scheel et al., Phys. Rev. Lett. **117**, 113902 (2016).
11. L. Olivieri, J. S. T. Gongora, and L. Peters, Optica **7**, 186 (2020).
12. L. Olivieri, J. S. T. Gongora, A. Pasquazi et al., ACS Photonics, **5**, 3379 (2018).
13. M. Q. Li, R. M. Lan, X. F. Liu et al., Appl. Phys. Lett. **117**, 084102 (2020).
14. S. S. Hodgman, W. Bu, S. B. Mann et al., Phys. Rev. Lett. **122**, 233601 (2019).
15. A. S. Chirkin, P. P. Gostev, D. P. Agapov et al., Laser Phys. Lett. **15**, 115404 (2018).
16. Д. П. Агапов, И. А. Беловолов, С. А. Магницкий и др., в сб. *XIII международные чтения по квантовой оптике* (IWQO-2019), стр. 252.
17. S. Magnitskiy, D. Agapov, and A. Chirkin, Opt. Lett. **47**, 754 (2022).
18. С. А. Магницкий, Д. П. Агапов, И. А. Беловолов и др., Вестник МГУ, сер. Физика, астрономия №6, 19 (2021).
19. Д. А. Балакин, Д. П. Агапов, П. П. Гостев и др., ЖЭТФ **162**, 811 (2022).
20. H. Wu, B. Han, Z. Wang et al., Opt. Express **28**, 9957 (2020).
21. C. Liu, J. Chen, J. Liu et al., Opt. Express **26**, 10048 (2018).
22. T. Fukui, Y. Kohno, R. Tang et al., J. Lightwave Technol. **39**, 839 (2021).
23. T. Fukui, Y. Nakano, and T. Tanemura, JOSA **38**, 3796 (2021).
24. O. Herman, O. Wagner, N. Shabairou, and Z. Zalevsky, Opt. Fiber Technol. **54** 102122 (2020).
25. A. M. Caravaca-Aguirre and R. Piestun, Opt. Express **25**, 1656 (2017).

-
26. V. L. Amitonova and J. F. de Boer, *Opt. Lett.* **43**, 5427 (2018).
27. S. Singh, S. Labouesse, and R. Piestun, *IEEE Trans. Comput. Imaging* **9**, 159 (2023).
28. D. Yang, M. Hao, G. Wu et al., *Optics and Lasers in Engineering* **149**, 106827 (2022).
29. Y. Xu, W. Liu, E. Zhang et al., *Opt. Express* **23**, 32993 (2015).
30. W. Gong, P. Zhang, X. Shen et al., *arXiv:0806.3543*.
31. Y. Tian, Z. Ding, H. Feng et al., *IEEE Photon. J.* **12**(6), 1 (2020).
32. А. В. Белинский, П. П. Гостев, С. А. Магницкий и др., *Письма в ЖЭТФ* **177**, 207 (2023).
33. Д. П. Агапов, И. А. Беловолов, П. П. Гостев и др., *ЖЭТФ* **162**, 215 (2022).
34. <https://github.com/vongostev/lightprop2d>
35. <https://github.com/vongostev/pyMMF>
36. M. D'Angelo, A. Valencia, M. H. Rubin et al., *Phys. Rev. A* **72**, 013810 (2005).

ХАРАКТЕРИСТИКИ ПРОТОН-ПРОТОННЫХ СТОЛКНОВЕНИЙ, СМОДЕЛИРОВАННЫХ С ПОМОЩЬЮ МОНТЕ-КАРЛО ГЕНЕРАТОРОВ, ПРИ ЭНЕРГИЯХ NICA

М. Ю. Азаркин^{*}, М. Р. Киракосян^{**}

Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук,
119991, Москва, Россия

Поступила в редакцию 22 сентября 2022 г.,
после переработки 26 марта 2023 г.
Принята к публикации 28 марта 2023 г.

Представлен обзор генераторов Монте-Карло (МК) для моделирования протон-протонных столкновений при энергиях коллайдера NICA, а также приведено сравнение результатов моделирования с имеющимися экспериментальными данными. В частности, средние множественности, средние поперечные импульсы и распределения по быстроте для $p(\bar{p})$, $\pi^\pm$, $K^\pm$ при различных энергиях столкновения сопоставлены с результатами моделирования с помощью генераторов событий PYTHIA, EPOS, SMASH и UrQMD. Также проведено сравнение данных, полученных с помощью МК-генераторов, с данными для двухчастичных корреляций стабильных заряженных частиц. Обсуждается влияние физических механизмов, используемых в данных МК-генераторах, на исследуемые наблюдаемые. Предложены измененные значения параметров физических моделей, заложенных в PYTHIA, что существенно улучшает описание экспериментальных данных.

DOI: 10.31857/S0044451023110044
EDN: PNFEML

1. ВВЕДЕНИЕ

NICA (Nuclotron-Based Ion Collider fAcility) [1] — это ускорительный комплекс, размещенный в Объединенном институте ядерных исследований (ОИЯИ) в Дубне. Он спроектирован с целью исследования протон-протонных столкновений в диапазоне энергий $4 \leq \sqrt{s} \leq 25$ ГэВ с предельной светимостью $L = 10^{32} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ и столкновений тяжелых ионов в диапазоне энергий $4 \leq \sqrt{s_{NN}} \leq 11$ ГэВ с предельной светимостью $L = 10^{27} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$.

Основными научными задачами NICA являются исследование плотной сильновзаимодействующей барионной материи, рожденной в столкновениях тяжелых ионов, и спиновой физики в столкновениях поляризованных протонов и легких ионов. Первая часть этой физической программы будет ис-

следоваться в эксперименте Многоцелевой Детектор (MPD) [2], вторая часть станет основным предметом изучения для Детектора Спиновой Физики (SPD) [3]. Ускорительный комплекс запустил свою научную программу в 2022 г., однако по планам основные детекторы комплекса, MPD и SPD, начнут работать в середине и конце 2020-х гг. соответственно [4].

Как было сказано выше, одной из главных задач физической программы NICA является исследование сильно-взаимодействующей плотной материи, рожденной в столкновениях тяжелых ионов (Au) при $\sqrt{s_{NN}}$ в диапазоне 4 – 11 ГэВ. Эта область энергий представляет особый интерес, поскольку в ней ожидается максимальная барионная плотность на стадии вымораживания [4, 5], а также становится возможным наблюдение критической точки (возможно даже тройной) на квантовомеханической (КХД) фазовой диаграмме [4, 6]. Очевидно, что физика столкновений тяжелых ионов является крайне сложной и комплексной. По этой причине симуляция столкновений тяжелых ионов с помощью генераторов Монте-Карло (МК) позволяет лучше понять физические механиз-

^{*} E-mail: azarkinmy@lebedev.ru

^{**} E-mail: kirakosyanmr@lebedev.ru

мы сильного взаимодействия. Однако корректная симуляция столкновений тяжелых ионов невозможна без адекватного понимания протон-протонных столкновений. Более того, характеристики последних используются для калибровки столкновений тяжелых ядер и позволяют выделить эффекты, относящиеся к фазовому переходу в плотной и горячей барионной материи. В настоящей работе мы рассматриваем физические механизмы p - p -столкновений и анализируем характеристики различных современных программ, Монте-Карло генераторов, для симуляции p - p -столкновений при энергиях NICA. Результаты моделирования сравниваются с имеющимися экспериментальными данными. В частности, мы используем данные по p - p -столкновениям при энергиях NICA, полученные главным образом в экспериментах, которые проводились в 60-х и 70-х гг. на коллайдере ISR [7, 8], а также в экспериментах NA49 [9], NA61/SHINE [10] на коллайдере SPS. Стоит упомянуть, что хороший обзор экспериментальных работ по выходам идентифицированных частиц в интересующем диапазоне энергий представлен в [11]. Отметим, однако, что ранние работы не давали полной информации по погрешностям и фазовому пространству, использованному для измерений. Поэтому данные разных экспериментов иногда оказывались почти противоречивыми. По этой причине современные МК-модели для симуляции неупругих столкновений при энергиях NICA никогда не были в достаточной степени настроены и вряд ли смогут хорошо описать данные экспериментов NICA.

Современный МК-генератор для симуляции столкновений адронов высоких энергий представляет собой комбинацию феноменологических моделей, дополненных теоретическими вычислениями, опирающимися главным образом на вычисления в рамках пертурбативной КХД (пКХД). Большая часть феноменологических моделей в генераторе сконструирована на основании определенного конечного набора экспериментальных данных, поэтому эти модели непрерывно совершенствуются. В контексте данного исследования наиболее важными феноменологическими составляющими являются начальное состояние сталкивающихся адронов, возбуждение струн и их фрагментация, дифракционные процессы с низкой массой.

В столкновениях с низкими энергиями пКХД неприменима, поскольку становится значимым непертурбативный вклад адронных резонансов в полное сечение, примерно до $\sqrt{s} \sim 5$ ГэВ они яв-

ляются одним из доминирующих компонентов. В диапазоне энергий 5–10 ГэВ резонансы пропадают и пКХД постепенно становится применимой, тем не менее, непертурбативная природа сильного взаимодействия все еще проявляет себя во многих аспектах рождения частиц. По этим причинам исследование характеристик МК-генераторов при этих энергиях столкновений является очень важным для развития феноменологического понимания сильного взаимодействия. В настоящей работе мы изучаем средние множественности, средние поперечные импульсы, распределения по быстроте для пионов, каонов, протонов, а также двухчастичные корреляции стабильных заряженных частиц. С экспериментальными данными сравниваются результаты, полученные с помощью следующих МК-генераторов: PYTHIA [13, 14], EPOS [15, 16], UrQMD [17, 18] и SMASH [19, 20].

Следует отметить, что существует некоторое количество других генераторов, которые могут быть использованы для физической программы NICA. Так, например, генераторы, QGSJET [22], PHOJET/DPMJET-III [23], а также генератор взаимодействий космических лучей SIBYLL [24] могут оказаться полезными вблизи энергий NICA (при этом ни SIBYLL, ни QGSJET не рекомендуется использовать для энергий ниже 10 ГэВ), однако полное исследование всех имеющихся генераторов выходит за рамки данной работы. Другие широко используемые генераторы — HERWIG [25, 26] и SHERPA [27]. Однако их нельзя использовать при энергиях NICA, так как в них отсутствует экстраполяция некоторых ключевых механизмов на данных энергиях. Поэтому в этой работе мы их не рассматривали.

Статья организована следующим образом. В разд. 2 приведено краткое описание генераторов Монте-Карло, которые будут протестированы в данной работе. В разд. 3 представлены экспериментальные данные по выходам разных частиц и двухчастичным корреляциям в p - p -столкновениях при энергиях NICA, приведено сравнение с результатами, полученными с помощью тестируемых МК-моделей, а также предложен модифицированный набор параметров для PYTHIA, который дает лучшее описание данных при $\sqrt{s} = 17.3$ ГэВ. В разд. 4 анализируются отличия результатов МК-симуляций от экспериментальных данных, а также ключевые особенности рождения частиц в исследуемых МК-генераторах.

2. МОДЕЛИ МОНТЕ-КАРЛО

Современные генераторы Монте-Карло для симуляции столкновения частиц в коллайдерных экспериментах уже развиваются в течение нескольких десятилетий и содержат множество механизмов для описания большого количества экспериментальных данных. В данной работе мы рассмотрим проблемы моделирования p - p -столкновений при энергиях NICA. Мы исследуем характеристики МК-генераторов, приведенных в разд. 1, а именно, следующие конкретные версии этих генераторов: PYTHIA 8.3, EPOS 3.4, UrQMD 3.4, SMASH 2.0.1. Стоит отметить, что они могут использоваться как для моделирования p - p -столкновений так и, в некоторой степени, для ядро-ядерных. PYTHIA — многоцелевой генератор для симуляции широкого круга физических процессов в p - p -столкновениях как на мягких, так и на жестких энергетических шкалах, другие генераторы в большей степени ориентированы на моделирование (мягких) КХД-процессов.

2.1. PYTHIA

Генератор PYTHIA является многоцелевым МК-генератором [13, 14] и широко применяется для моделирования экспериментальных данных в течение трех последних десятилетий. Генератор PYTHIA использует различные как пертурбативные, так и непертурбативные физические механизмы и предназначен для описания широкого набора характеристик столкновений протонов. Непертурбативные механизмы в PYTHIA представляют собой феноменологическую аппроксимацию экспериментальных данных, тогда как пертурбативные вычисляются с использованием соответствующего математического формализма. PYTHIA является одним из самых широко используемых генераторов в физике высоких энергий, в связи с чем его компоненты и физические подходы (струнная фрагментация, полное сечение, дифракция и упругое рассеяние и т. д.) были впоследствии использованы и в других генераторах.

В разд. 3.1.1 проводится подгонка некоторых физических параметров, поэтому ниже мы перечислим основные механизмы со ссылками на соответствующую литературу. На начальном этапе моделируется физика полного, упругого и дифракционных сечений (Total, Elastic, Diffraction — TED). В PYTHIA по умолчанию TED описывается простой параметризацией, основанной на обмене померонов, а именно, модификацией Шуллера–Сьостранда [28] модели Доннахи–Ландшюффа [29]. Другая доступная мо-

дель для физики TED, которая лучше описывает данные при энергиях NICA — относительно недавно внедренная параметризация ABMST, основанная на обмене как померонов, так и реджеонов [30, 31].

Для учета мультипартонных взаимодействий (МПВ) в PYTHIA была разработана специализированная комплексная модель [32]. Механизм мультипартонных взаимодействий связан непосредственно с механизмом описания так называемых остатков исходного адрона (ОИА), по определению представляющих собой оставшуюся часть адрона после жестких взаимодействий. ОИА играет важную роль в рождении частиц в передней области быстрот при энергиях NICA. Лундовская модель струнной фрагментации используется на заключительной стадии для формирования адронов из рожденных в результате взаимодействий партонов. Параметры рождения определенных типов адронов получены из данных по рассеянию e^+e^- и, как считается, могут универсально применяться к столкновениям адронов.

2.2. EPOS

EPOS является генератором событий столкновения как протонов, так и ионов. Название EPOS [15, 16] представляет собой аббревиатуру от Energy Conserving Quantum Mechanical Multiple Scattering Approach Based on (E), Parton Ladders (P), Off-Shell Remnants (O), Splitting of Parton Ladders (S). Ниже мы представим краткий обзор физических механизмов генератора EPOS, используемых для моделирования столкновений протонов.

Основой генератора EPOS является партонная модель Грибова–Реджи, в которой партоны многократно рассеиваются через инспирированные пертурбативной квантовой хромодинамикой лестничные диаграммы, где открытые лестничные диаграммы представляют собой реджионы (разрезанный померон), а закрытые — помероны.

Однако лестничные диаграммы в EPOS хоть и получены в рамках пертурбативной КХД, не являются пертурбативными, поскольку содержат как мягкую, так и жесткую части (см. ниже). Это позволяет EPOS описывать мягкое рассеяние (дифракционное, упругое), жесткое рассеяние и мультипартонные взаимодействия в рамках одного подхода. Эффекты насыщения учитываются с помощью механизма расщепления лестниц. Партонные функции распределения не добавлены *ad hoc*, так как представляют собой результат динамического процесса

испускания партонов, который моделируется в рамках подхода EPOS.

На последней стадии столкновений каждая партоновая лестница переводится в две струны (остатки считаются бесцветными объектами), которая затем фрагментируется в адроны. EPOS содержит специальные модели для учета коллективных феноменов, а именно, модель ядра-короны (core-corona) и гидродинамическую эволюцию. В этом подходе каждая струна считается принадлежащей либо ядру, либо короне. Струны в области ядра подвержены дополнительной гидродинамической эволюции, т. е. фрагментируются с добавлением продольных и радиальных потоковых эффектов. При этом струны в короне фрагментируются стандартным образом [33].

2.3. UrQMD

UrQMD [17, 18] (Ultrarelativistic Quantum Molecular Dynamics) является генератором столкновений тяжелых ионов, который включает микроскопическую теорию переноса (уравнение Больцмана–Ухлинга–Унлебека) со столкновительным членом, учитывающим рассеяние разных частиц. Мягкие взаимодействия между нуклонами учитываются с помощью потенциала по типу потенциала Скирма (молекулярная динамика), который позволяет получить уравнение состояния для системы многих тел. Данные взаимодействия нерелевантны для столкновений протонов. Парционные сечения для разных частиц включены в модель UrQMD. Для наиболее базовых и распространенных сечений используется аппроксимация экспериментальных данных. В случае, если экспериментальные данные отсутствуют, то используется модель детального баланса (см. [17]). Дифференциальные сечения, т. е. угловые распределения, для каждого элементарного адрон-адронного $2 \rightarrow 2$ процесса используют общую формулу, полученную в рамках эффективной теории поля со взаимодействием посредством обмена σ -, ω - и π -мезонов [34]. Наконец, для взаимодействий при высоких энергиях используется лундовская струнная модель для расчета струнных возбуждений и последующей фрагментации.

2.4. SMASH

Генератор SMASH (Simulating Many Accelerated Strongly-interacting Hadrons) [19, 20] разработан для моделирования столкновений разнообразных систем адронов и ядер. Так же как и в генераторе UrQMD, столкновения ядер в SMASH рассматриваются в

рамках модели переноса путем численного решения релятивистского аналога уравнения Больцмана, хотя сам подход немного изменен. Ключевые характеристики генератора, имеющие отношение к столкновениям адронов, заключаются в том, что взаимодействие адронов разбито на несколько механизмов, вносящих различный вклад в зависимости от энергии взаимодействия в системе центра масс. При $\sqrt{s} < 4$ ГэВ p - p -столкновения описываются с помощью образования резонансов, возбуждений и их распада. При переходных энергиях $4 < \sqrt{s} < 5$ ГэВ вклад от резонансов постепенно уменьшается (используется плавная весовая функция) и используется модель мягких струнных возбуждений. При $\sqrt{s} > 5$ ГэВ SMASH начинает использовать основанные на пертурбативной КХД процессы из PYTHIA, однако жесткое партонное рассеяние начинает играть роль уже при существенно больших энергиях (см. [20], рис. 1). Фрагментация партонов в адроны производится подключением PYTHIA.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

3.1. Выходы частиц

Ранние данные по рождению адронов в основном были получены в коллайдерных экспериментах с фиксированной мишенью, в частности в Брукхейвенской национальной лаборатории (энергия налетающих протонов: 2.4, 2.85, 5, 6.9, 8 ГэВ, [35–40]), в Принстоне на ускорителе PPS (энергия налетающих протонов: 2.54, 2.88, 3.03 ГэВ [41]), в ЦЕРНе на ускорителях PS (энергия налетающих протонов: 5.5, 19, 12, 24 ГэВ) [42–46], ISR (энергия налетающих протонов: 22, 31, 45, 53 ГэВ) [7, 8] и SPS (энергия налетающих протонов: 200, 360 ГэВ) [47, 48]), в Аргонской национальной лаборатории (энергия налетающих протонов: 6, 12.4, 102 ГэВ) [49–52], в Серпухове SPS (энергия налетающих протонов: 32, 69 ГэВ) [53, 54]) и Фермилабе (энергия налетающих протонов: 100, 147, 200, 205, 300, 400 ГэВ) [55–60]. Измерения и идентификация частиц были выполнены с помощью пузырьковых камер, время-пролетных систем, черенковских детекторов и комбинированных систем [7, 8, 47, 48, 56]. Многие из перечисленных выше экспериментов обладали низкой эффективностью идентификации частиц и весьма ограниченным акцептансом.

Относительно недавние данные по рождению адронов в p - p -столкновениях при энергиях NICA были получены в экспериментах с фиксированной ми-

шению NA49 [61] и NA61/SHINE [62] на ускорителе SPS в ЦЕРНе. В NA49 использовался спектрометр с широким аксептансом, измерения импульса проводились с применением магнитного поля, а идентификация частиц осуществлялась с помощью измерения удельных потерь dE/dx и времени пролета. Эксперимент проводился с 1994 г. по 2002 г. Эксперимент NA61/SHINE является прямым продолжением NA49, но имеет значительное улучшенную точность измерения dE/dx и времени пролета, а также позволяет измерять энергии фрагментов ядер в тяжело-ионной программе. Однако к измерениям, полученным в NA61, стоит относиться с осторожностью. Например, в работе по анализу рождения π^- в широком диапазоне энергий столкновений было показано, что есть значимые расхождения данных эксперимента NA61 и глобальных аппроксимаций, полученных в большом количестве экспериментов.

В данном разделе представлены результаты моделирования p - p -столкновений при энергиях NICA с помощью четырех МК-генераторов, с помощью которых вычислены средняя множественность, средний поперечный импульс и распределение по быстротам для различных адронов. А именно, для этого исследования были выбраны генераторы EPOS 3.4, PYTHIA 8.306, UrQMD 3.4 и SMASH 2.0.1 по причинам, приведенным в разд. 2. Результаты симуляции сравниваются с данными, полученными в экспериментах, описанных выше. По результатам сравнения была предложена модифицированную модель PYTHIA 8.306, которая лучше описывает экспериментальные данные, чем исходная — PYTHIA 8.306 MB17, где «MB» означает Minimum Bias (события с минимальным смещением). Как для экспериментальных данных, так и для МК-симуляции используется инклюзивный отбор неупругих столкновений (также известный как минимально-смещенные события, Minimum-Bias Events).

Множественность частиц — одна из основных характеристик столкновения высокоэнергетических частиц, она несет информацию почти обо всех процессах рождения частиц. Поэтому при тестировании того, какая из моделей лучше описывает экспериментальные данные, эта наблюдаемая используется в первую очередь. В настоящей работе мы сравниваем имеющиеся экспериментальные данные по средним множественностям пионов, каонов и протонов с данными, полученными с использованием упомянутых выше МК-генераторов. Зависимости средней множественности π^+ и π^- от энергии столкновений представлены на рис. 1. Как имеющиеся экспериментальные данные, так и данные, полученные с

использованием МК-моделей, демонстрируют плавный монотонный рост множественности пионов с ростом $\sqrt{s}$. Разница между π^+ и π^- , очевидно, связана с проявлением закона сохранения заряда, что особенно заметно при малой множественности рожденных частиц. Как видно из рис. 1, результаты, полученные с использованием EPOS 3.4, находятся в согласии с экспериментальными данными в пределах погрешностей. PYTHIA 8.306 описывает данные в диапазоне $6.3 \leq \sqrt{s} \leq 12.3$ ГэВ, однако полученные результаты демонстрируют превышение до 10% при наиболее высоких из изучаемых энергий. PYTHIA 8.306 MB17 дает практически такую же множественность, что и стандартная версия в диапазоне $6.3 \leq \sqrt{s} \leq 12.3$ ГэВ, однако при более высоких энергиях результаты оказываются намного лучше. Модели SMASH 2.0.1 и UrQMD 3.4 значительно недооценивают множественность пионов.

Аналогичные заключения могут быть сделаны и о зависимостях средней множественности каонов от энергии столкновений, которые приведены на рис. 2. Однако для средней множественности протонов наблюдается принципиально другая картина, что демонстрирует рис. 3 (левая панель). Существующие экспериментальные данные обладают весьма большой погрешностью, тем не менее, можно сделать вывод, что протонная множественность варьируется от 1 до 1.5 в изучаемом диапазоне $\sqrt{s}$. Результаты, полученные с использованием МК-генераторов, демонстрируют почти плоскую зависимость со средним значением $\langle N_p \rangle \approx 1.2$ для EPOS 3.4 и PYTHIA 8.306 и со средним значением $\langle N_p \rangle \approx 1.5$ для UrQMD 3.4 и SMASH 2.0.1. Зависимости множественности антипротонов от $\sqrt{s}$ показаны на рис. 3 (правая панель). Они качественно похожи на то, что наблюдается для пионов и каонов. Отличия результатов для протонов и антипротонов, очевидно, связаны с существенными различиями основных механизмов их рождения. Это будет обсуждаться ниже вместе с интерпретацией их распределений по быстроте.

Отдельно стоит отметить, что в экспериментах NA49 и NA61/SHINE были проведены высококачественные измерения и для других адронов при $\sqrt{s} = 17.3$ ГэВ. Эти экспериментальные данные были собраны вместе и проинтерпретированы в рамках статистической модели адронизации [64]. Выяснилось, что модель может адекватно описывать данные, если канонические объемы адронов с открытой странностью и без нее различны. Сравнение этих данных с результатами, полученными с использованием МК-генераторов, представлено на рис. 4. Из

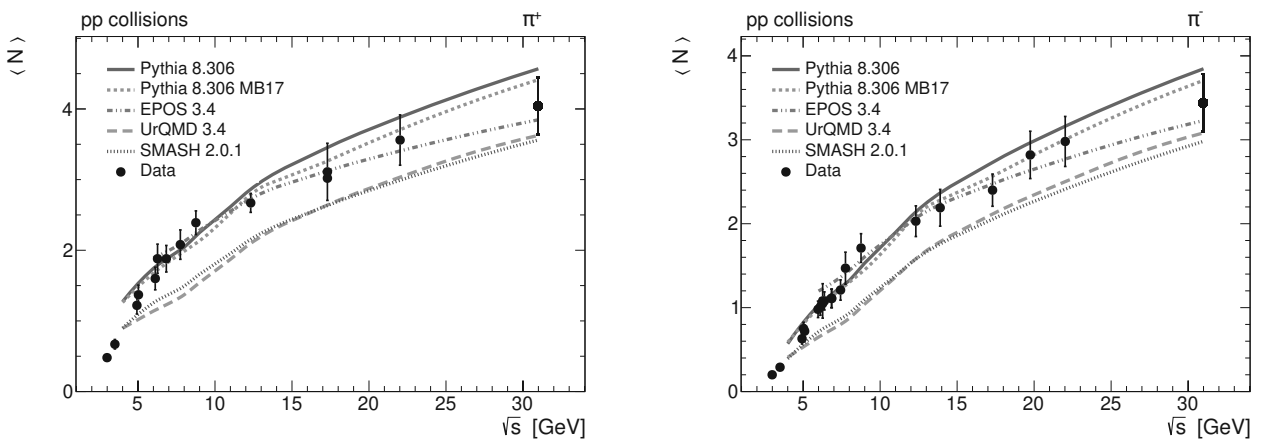


Рис. 1. Инклюзивная множественность π^+ (левая панель) и π^- (правая панель) как функция $\sqrt{s}$

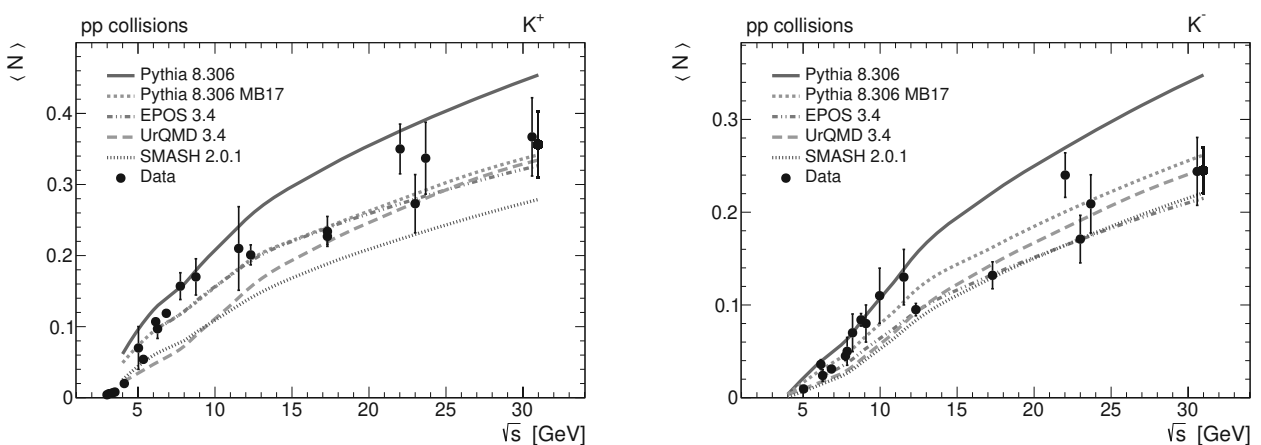


Рис. 2. Инклюзивная множественность K^+ (левая панель) и K^- (правая панель) как функция $\sqrt{s}$

этого сравнения видно, что параметры генератора EPOS 3.4 подогнаны так, что он хорошо описывает данные, хотя средняя множественность Ξ описывается не так хорошо, как для других частиц. Стандартная версия РУТНΙΑ 8.306 предсказывает завышенные значения выходов частиц, вероятно потому, что заложенная модель подгонялась под данные при энергиях LHC. РУТНΙΑ 8.306 MB17 с модифицированным набором параметров описывает данные значительно лучше. UrQMD 3.4 и SMASH 2.0.1 заметно занижают значение множественности большинства частиц. Таким образом, относительные отличия имеющихся экспериментальных данных и результатов МК-симуляций практически одинаковы для расширенных списков мезонов и барионов.

Другой основной характеристикой является поперечный импульс p_T образующихся частиц. Это важно как для понимания механизмов рождения

частиц, так и для оптимизации конструкции детектора. На рис. 5, 6, 7 показаны зависимости среднего поперечного импульса ($\langle p_T \rangle$) пионов, каонов и протонов от энергии столкновения для различных МК-моделей. Отличительной особенностью этих зависимостей является то, что средний поперечный импульс $\langle p_T \rangle$ почти плоский при $\sqrt{s} > 10$ ГэВ и почти одинаков для частиц и античастиц. Тем не менее, каоны и протоны имеют большие значения $\langle p_T \rangle$, чем пионы. Однако для величины $\langle p_T \rangle$ для различных МК-моделей наблюдается значительный разброс (до 25%), хотя генераторы EPOS 3.4 и РУТНΙΑ 8.306 MB17 при $\sqrt{s} > 10$ ГэВ дают близкие значения. Эти результаты в первом приближении согласуются с данными, полученными недавно в эксперименте NA61/SHINE [10], хотя экспериментально измеренные двумерные распределения $\frac{dN}{dy dp_T}$ не позволяют получить точные значения $\langle p_T \rangle$ из-за слепых зон в

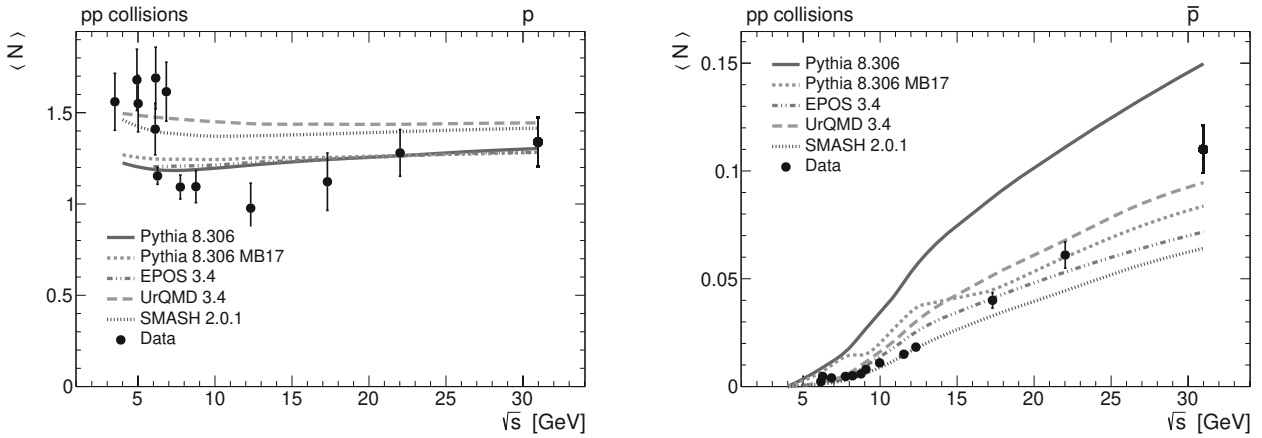


Рис. 3. Инклюзивная множественность p (левая панель) и $\bar{p}$ (правая панель) как функция $\sqrt{s}$

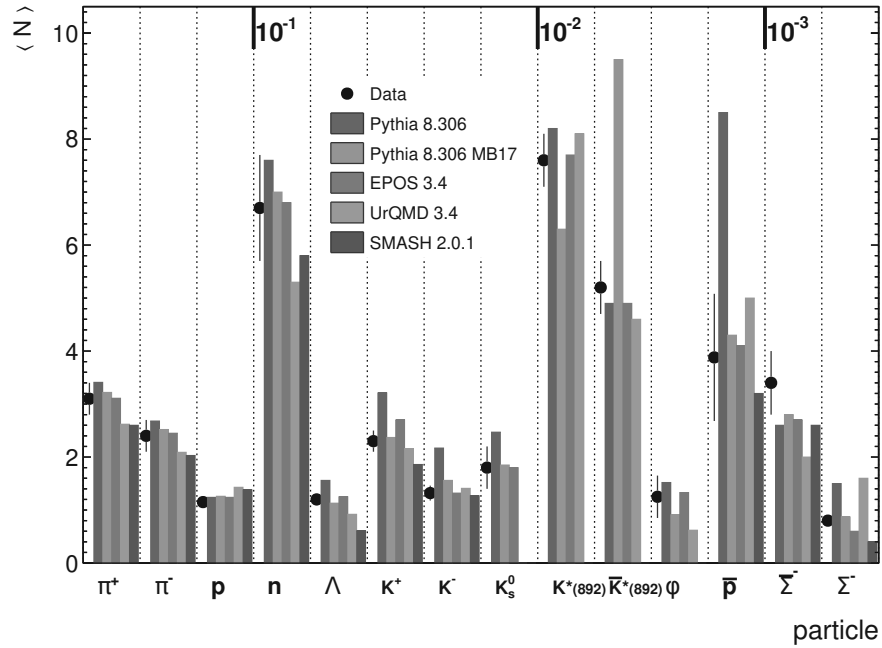


Рис. 4. Инклюзивная множественность различных адронов при $\sqrt{s} = 17$ ГэВ. Частицы упорядочены слева направо в порядке убывания множественности. Значения в верхней части рисунка определяют масштаб множественности частиц, находящихся между толстыми делениями

аксептансе детектора и провести их непосредственное сравнение.

На быстроту распределения рожденных частиц, очевидно, влияют почти все физические механизмы, используемые в генераторах. Ниже мы сравниваем распределения по скорости для $\pi^\pm$, $K^\pm$ и $p(\bar{p})$, измеренные в эксперименте NA61/SHINE [10] и полученные при моделировании с помощью исследуемых МК-генераторов. Сравнение выполнено

для $\sqrt{s} = 6.3, 12.3$ и 17.3 ГэВ, что покрывает большую часть диапазона энергий NICA для p -столкновений. Однако для максимально достижимых энергий на NICA (т.е. $\sqrt{s}$ до 25 ГэВ) нет экспериментальных данных, полученных с применением современных детекторов и методик. Стоит также еще раз напомнить, что систематические ошибки для данных, полученных в эксперименте NA61, могут быть существенно занижены [63].

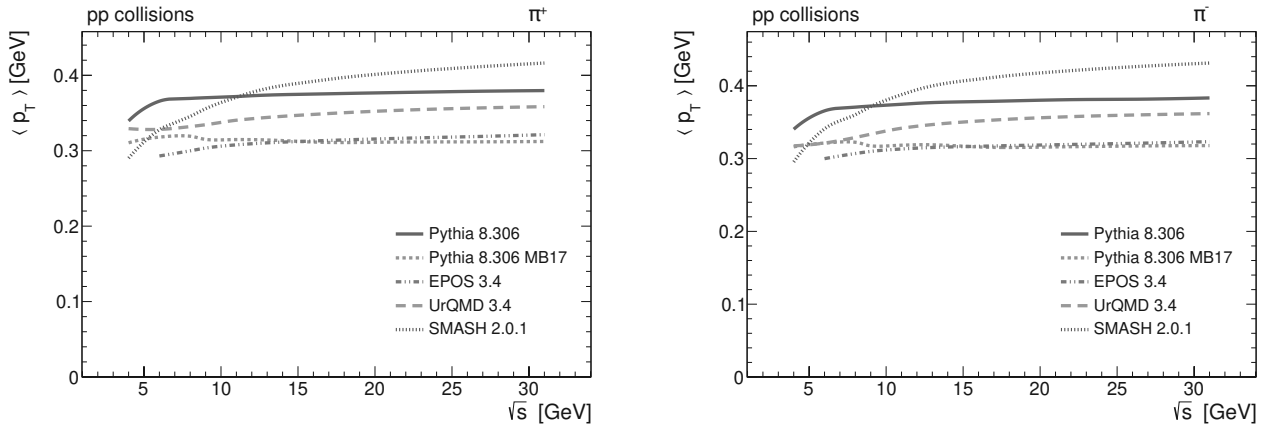


Рис. 5. Среднее p_T для π^+ (левая панель) и π^- (правая панель) как функции $\sqrt{s}$

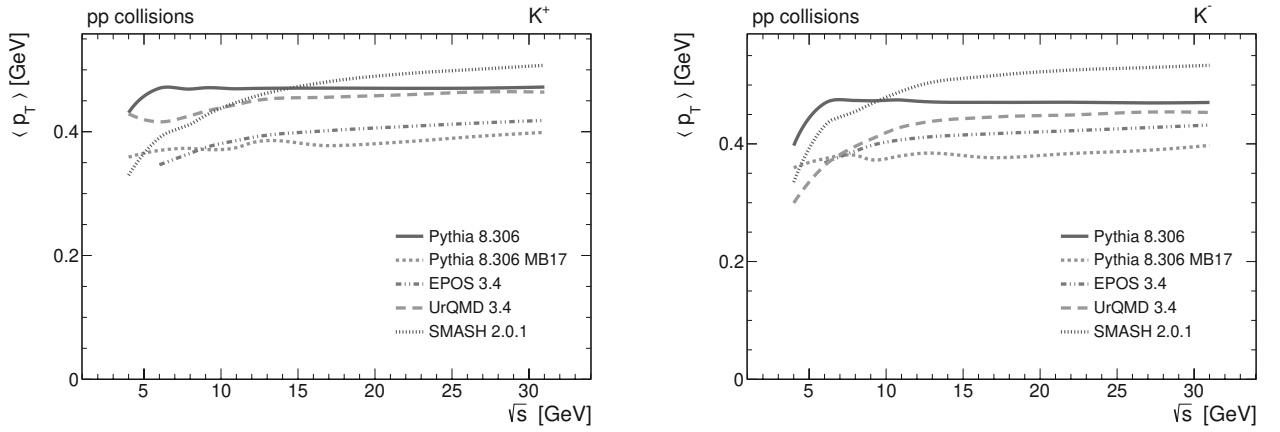


Рис. 6. Среднее p_T для K^+ (левая панель) и K^- (правая панель) как функции $\sqrt{s}$

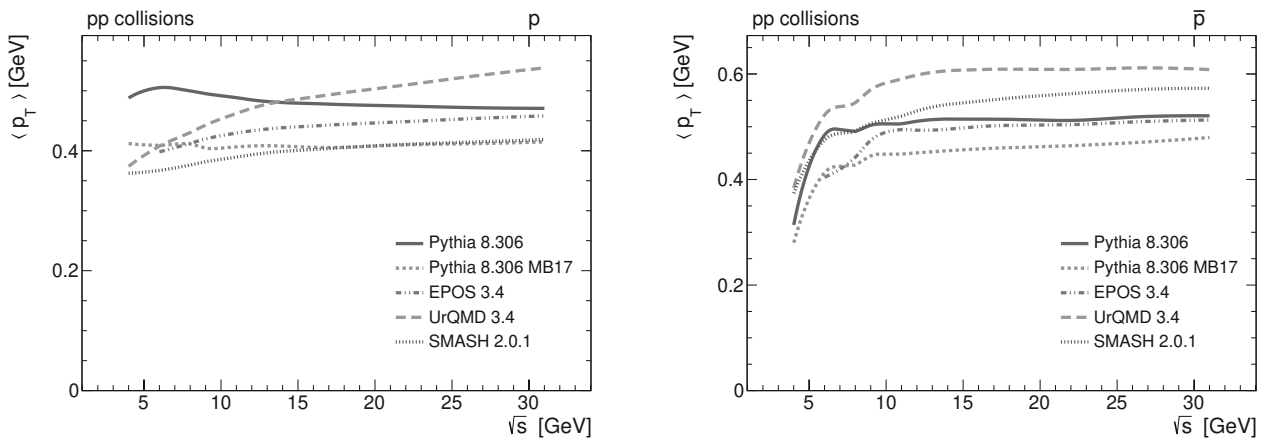


Рис. 7. Среднее p_T для p (левая панель) и $\bar{p}$ (правая панель) как функции $\sqrt{s}$

На рис. 8 показаны распределения по быстрой для π^+ и π^- для экспериментальных данных и данных, полученных с использованием МК-генераторов, при $\sqrt{s} = 6.3, 12.3$ и 17.3 ГэВ. Все модели и данные показывают, что быстрые рожденных пионов имеют максимум при $y = 0$ и снижаются до уровня в несколько процентов от максимума при $y = 3$. Основное различие между π^+ и π^- заключается в снижении выхода последних и более узком распределении по y . π^+ имеют более широкое распределение, поскольку с большей вероятностью содержат валентные кварки сталкивающихся протонов. Те же выводы применимы к распределениям по быстрой для K^+ и K^- , показанные на рис. 9.

На рис. 10 показаны распределения по быстрой для протонов и антипротонов для экспериментальных данных и данных, полученных с использованием тестируемых МК-моделей, при $\sqrt{s} = 6.3, 12.3$ и 17.3 ГэВ. Распределение протонов имеет широкие максимумы в диапазоне быстрых $1 < |y| < 2.5$ как для экспериментальных данных, так и для результатов, полученных с помощью моделей. Зависимости, полученные с использованием МК-генераторов, демонстрируют еще один узкий максимум на краю распределений. При этом антипротоны имеют единственный максимум при $y = 0$. Следует отметить, что множественность протонов существенно выше, чем антипротонов и даже более легких каонов. Сохранение барионного числа играет важную роль, заставляя ОИА (который в первом приближении считается дикварком) распадаться обратно на протоны, сохраняя большую долю импульса входящих протонов. Напротив, антипротоны в основном образуются при фрагментации струны, натянутой при рассеянии морских кварков. В рождение антипротонов дают вклад и другие процессы, например, включающие рассеяние морских кварков на валентных и фрагментация чисто глюонных струн.

Что касается моделей МС для распределений протонов, то EPOS 3.4 немного завышает значения высоты первого (широкого) максимума при всех энергиях столкновения, в то время как RUTHIA 8.306, SMASH 2.0.1 и UrQMD 3.4 не описывают данные для самых центральных быстрых, а также широкие пики при всех исследованных энергиях столкновения. Следует отметить, что описание продольного импульса протонов представляет собой проблему для моделей типа Fritiof [65, 66].

Таким образом, полученные результаты указывают на следующие проблемы с механизмами ро-

ждения адронов для различных генераторов и параметров моделей.

1. Как видно из рис. 10, для всех генераторов имеются проблемы с описанием пиков в распределениях протонов по быстрой. Широкий пик связан, вероятно, с адронизацией остатков исходных протонов. Как можно видеть, модель ОИА в RUTHIA, SMASH, UrQMD в нынешнем виде не способна адекватно описать данные. Второй острый пик на самом краю быстрых распределений при $\sqrt{s} = 6.3, 12.3$ и 17.3 ГэВ присутствует для всех четырех генераторов (т. е. присутствует и в EPOS), но не наблюдается в экспериментальных данных, что связано с механизмом дифракции.

2. Антипротоны, наоборот, образуются при фрагментации струны, натянутой при жестком рассеянии валентных кварков. Расхождение данных RUTHIA и экспериментальных данных для множественности антипротонов скорее всего связано с фрагментацией RUTHIA на барионы, так как превышение выхода мезонов не столь велико.

3. Оба генератора SMASH и UrQMD недооценивают выход адронов вне резонансной области и в то же время завышают дифракционное сечение. UrQMD также завышает рождение антипротонов в диапазоне энергий 6–20 ГэВ. Скорее всего, настройка параметров рождения мягких струн (см. разд. 2.3 и разд. 2.4) улучшит описание данных при таких энергиях.

4. Как видно из рис. 10, SMASH дает разумное описание экспериментальных распределений по быстрой для протонов, за исключением нескольких точек с самыми высокими y (т. е. области дифракции). Такое преимущество над другими генераторами связано со специальной функцией фрагментации для лидирующих барионов, которые при таких энергиях обычно являются протонами.

3.1.1. Подгонка параметров RUTHIA при энергиях NICA

Как упоминалось ранее, стандартная версия RUTHIA 8.306 для моделирования столкновений с минимально смещенной выборкой была оптимизирована для наилучшего описания данных при высоких энергиях (Теватрон, LHC). В данной работе мы показываем, что изменение некоторых базовых параметров генератора может значительно улучшить описание данных при $\sqrt{s} = 17.3$ ГэВ.

Как видно из разд. 3.1, существует значительное расхождение между результатами, полученными с

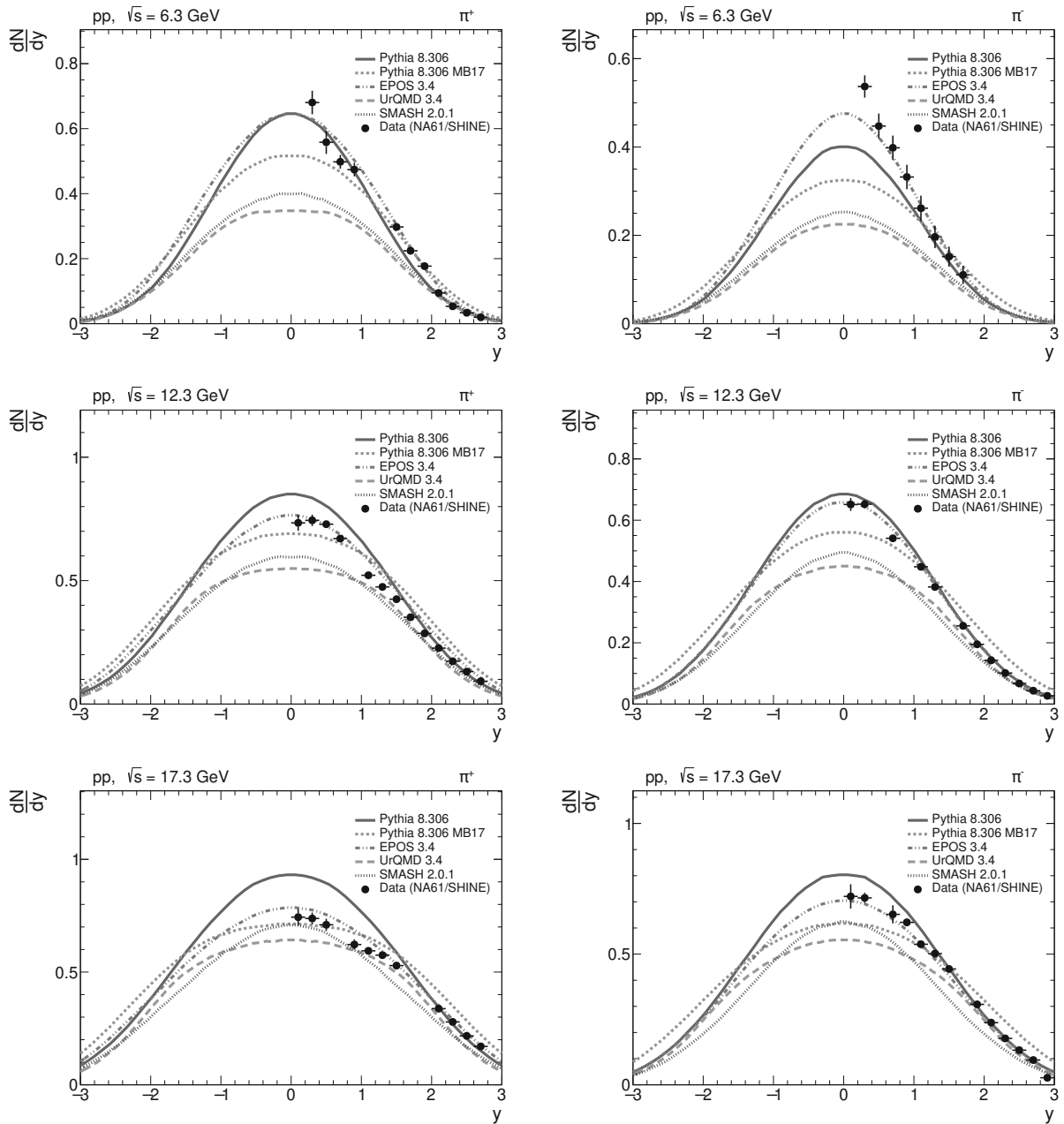


Рис. 8. Распределения по быстрой для π^+ (левая колонка) и π^- (правая колонка) при $\sqrt{s} = 6.3$ ГэВ (верхний ряд), $\sqrt{s} = 12.3$ ГэВ (средний ряд) и $\sqrt{s} = 17.3$ ГэВ (нижний ряд)

использованием стандартной версии РУТНΙΑ 8.306, и имеющимися экспериментальными данными. В частности, моделирование с помощью РУТНΙΑ 8.306 со значениями параметров по умолчанию показывает более высокую плотность адронов в центральных быстройтах и недостаток продольного импульса у протонов. Поэтому естественно начать с настройки параметров ПДУ. РУТНΙΑ 8.306 также предлагает возможность использовать модель АВМСТ,

лучше описывающую данные в диапазоне энергий $17.2 < \sqrt{s} < 546$ ГэВ, и ее расширенную версию (см. разд. 2.1), которая устраняет известные проблемы стандартной модели АВМСТ и является более гибкой в настройке параметров. Поэтому в нашей попытке приблизить результаты РУТНΙΑ 8.306 к имеющимся экспериментальным данным при энергиях NICA в качестве отправной точки была выбрана расширенная модель АВМСТ. Для лучше-

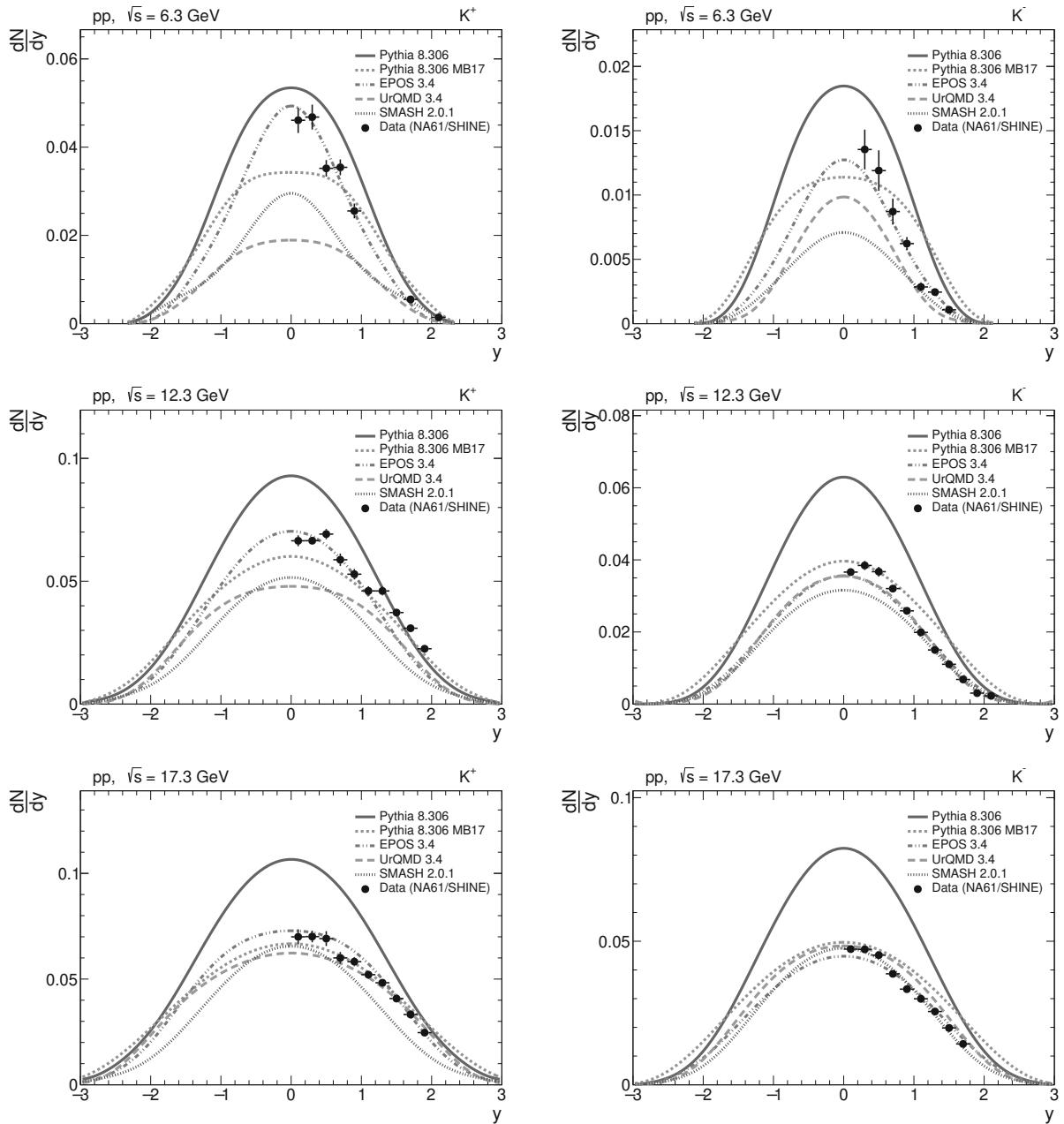


Рис. 9. Распределения по быстрой для K^+ (левая колонка) и K^- (правая колонка) при $\sqrt{s} = 6.3$ ГэВ (верхний ряд), $\sqrt{s} = 12.3$ ГэВ (средний ряд) и $\sqrt{s} = 17.3$ ГэВ (нижний ряд)

го описания данных были изменены некоторые параметры дифракции. Так, было уменьшено сечение одиночной дифракции (k -фактор, т. е. параметр `SigmaDiffractive:ABMSTmultSD`, был положен равным 0.75) и был сужен диапазон для подавления событий с малым разрывом по быстрой. Таким образом, это был частичный возврат к исходной модели ABMST. Значения настроенных параметров вместе со значениями по умолчанию приведены в табл. 1.

Как отмечено ранее, PYTHIA 8.306 завышает значения выходов большинства частиц (а именно, пионов, каонов, антипротонов) в центральных быстрой, что указывает на то, что PYTHIA завышает среднее число пертурбативных партонных взаимодействий. Чтобы решить эту проблему, было скорректировано значение p_{T0} , которое регулирует инфракрасную расходимость партонного рассеяния $2 \rightarrow 2$. Справедливо сказать, что это до-

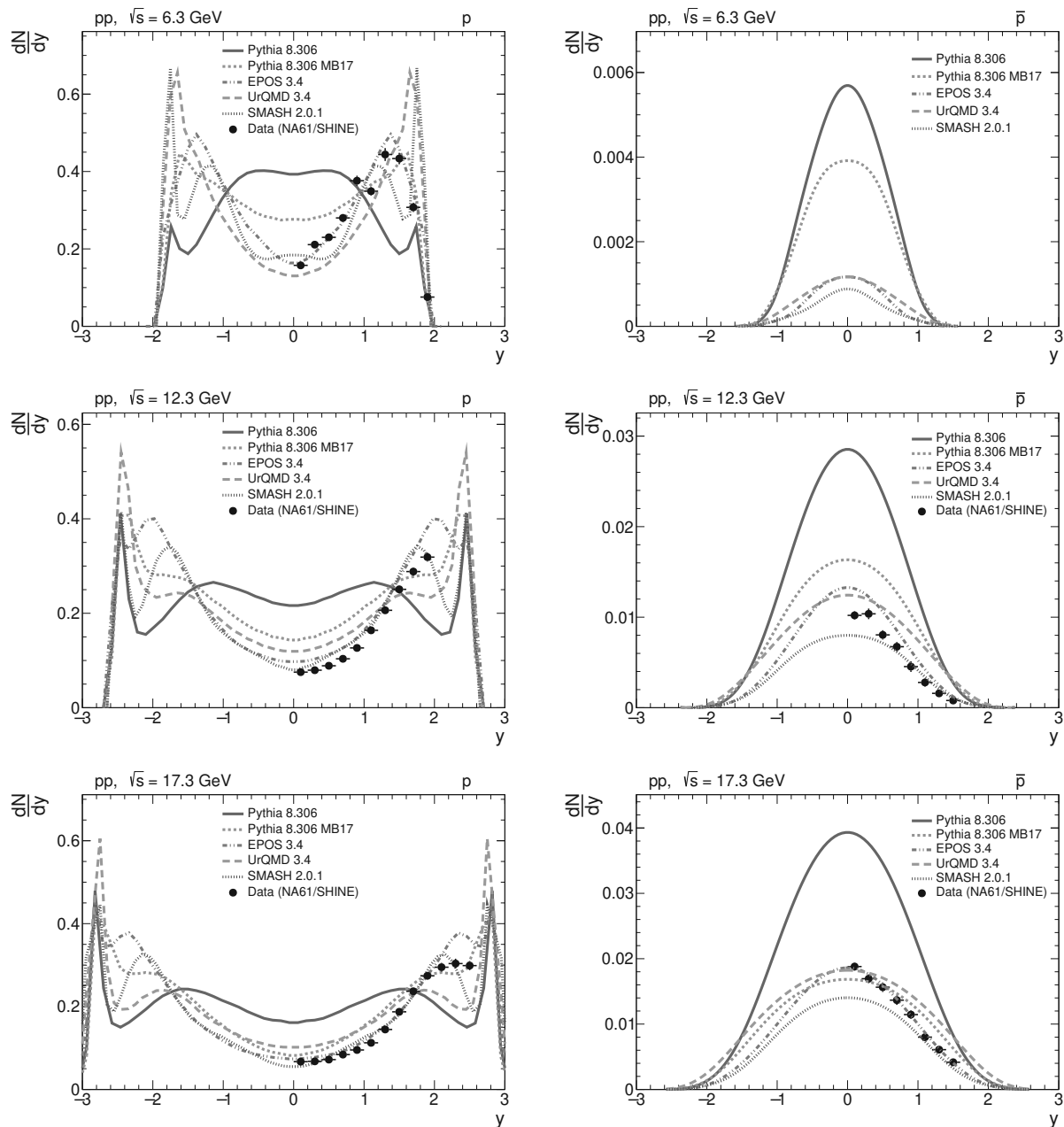


Рис. 10. Распределения протонов (левая колонка) и антипротонов (правая колонка) по быстройте при $\sqrt{s} = 6.3$ ГэВ (верхний ряд), $\sqrt{s} = 12.3$ ГэВ (средний ряд) и $\sqrt{s} = 17.3$ ГэВ (нижний ряд). Распределение антипротонов по быстройте для PYTHIA 8.306 при $\sqrt{s} = 6.3$ ГэВ не показано, так как оно находится за пределами графика

вольно стандартный шаг для процедуры подгонки модели в физике столкновений адронов при минимально смещенной выборке событий. Чтобы уменьшить количество взаимодействий, нужно увеличить p_{T0} . Значение p_{T0} было изменено так, чтобы оно было как можно больше при $\sqrt{s} = 17.3$ ГэВ, т.е. $\sigma_{\text{int}} \approx \sigma_{\text{in ND}}$, и, таким образом было минимизировано смещение выборки событий. Практиче-

ски для увеличения p_{T0} был уменьшен параметр `MultipartonInteractions:ecmPow`, в результате зависимость σ_{int} от $\sqrt{s}$ стала более плоской, что лучше согласуется с экспериментально измеренными значениями $\sigma_{\text{in ND}}$ в зависимости от $\sqrt{s}$ в данном диапазоне энергий.

Однако следует отметить, что значение p_{T0} необходимо перенастраивать для каждой энергии, по-

скольку степенная зависимость от $\sqrt{s}$ не является фундаментальной и не отражает в должной степени зависимости σ_{inND} от $\sqrt{s}$ при низких энергиях. Как видно из зависимости множественности от $\sqrt{s}$ и распределений по псевдобыстроте, РYТНIA предсказывает более высокие значения множественностей странных частиц и антипротонов. По этой причине были изменены два струнных параметра, а именно: `probStoUD` и `StringFlav:probQQtoQ`. Первый является фактором подавления рождения s -кварка относительно u - и d -кварков при распаде струн, второй — фактором подавления рождения дикварка.

Еще одним важным параметром в нашем рассмотрении является поперечный импульс, приобретаемый кварком и антикварком при каждом разрыве струны. По умолчанию РYТНIA 8.306 использует распределение Гаусса с шириной, заданной параметром `StringPT:SigmaPt`. Мы обнаружили, что умеренное уменьшение значений этого параметра улучшает согласие полученных результатов с имеющимися экспериментальными данными. Для дальнейшего улучшения результатов моделирования распределения протонов по быстройте модель остатков исходных адронов была изменена на новую модель, которая использует правила КХД-цветов (см. разд. 2.1), т.е. параметрам `BeamRemnants:remnantMode` и `ColourReconnection:mode` было присвоено значение 1. Также было обнаружено, что некоторое уменьшение первоначального поперечного импульса k_T улучшает результаты моделирования распределения по псевдобыстроте для всех частиц. Все перенастроенные параметры приведены в таблице.

3.2. Двухчастичные угловые корреляции

Двухчастичные угловые корреляционные функции служат незаменимым инструментом для изучения рождения частиц как в p - p -столкновениях, так и в релятивистских столкновениях тяжелых ионов. В данной работе изучаются угловые корреляции между стабильными ($\sigma_T > 1$ см) заряженными частицами в p - p -столкновениях для разных МК-моделей при энергиях NICA. Полученные результаты затем сравниваются с экспериментальными данными NA61/SHINE.

Можно выделить четыре различных источника корреляций при энергиях NICA. Первый является отражением фрагментации струн. Этот процесс в основном приводит к относительно коротким по быстройте корреляциям. Второй связан с распадом промежуточных возбужденных состояний. Третий

возникает из-за фрагментации остатков исходных адронов. Четвертый — дифракция, которая приводит к дальним по быстройте корреляциям. При самых высоких энергиях NICA могут проявляться корреляции, связанные с появлением адронных струй, корреляции МПВ и корреляции, индуцированные радиацией в начальном и конечном состояниях.

Мы следуем стандартному подходу [67] (который также используется в NA61/SHINE) для вычисления двухчастичной угловой корреляции, которая определена следующим образом:

$$C(\Delta\eta, \Delta\phi) = \left\langle \left(\frac{S_N(\Delta\eta, \Delta\phi)}{B_N(\Delta\eta, \Delta\phi)} \right) \right\rangle_{\text{events}}, \quad (1)$$

где $\Delta\eta = (\eta_1 - \eta_2)$ и $\Delta\phi = (\phi_1 - \phi_2)$ — разности псевдобыстрот и азимутального угла двух частиц, соответственно. Величины S_N и B_N представляют собой распределение сигнала и распределение случайного фона и определяются как

$$S_N(\Delta\eta, \Delta\phi) = \frac{1}{N^{\text{pair}}} \frac{d^2 N^{\text{pair}}}{d\Delta\eta d\Delta\phi}, \quad (2)$$

$$B_N(\Delta\eta, \Delta\phi) = \frac{1}{N^{\text{mixed}}} \frac{d^2 N^{\text{mixed}}}{d\Delta\eta d\Delta\phi}. \quad (3)$$

Распределение сигнала S_N получается подсчетом всех заряженных пар (N^{pair}) в каждом событии с множественностью частиц N . Распределение фона B_N получается подсчетом числа пар частиц из двух случайно-выбранных событий (N^{mixed}) с тем же N . Окончательное распределение $C(\Delta\eta, \Delta\phi)$ получается усреднением по всем событиям.

Сравним корреляции стабильных заряженных частиц, полученные с использованием МК-генераторов (РYТНIA 8.306, EPOS 3.4, UrQMD 3.4, и SMASH 2.0.1), с данными, полученными коллаборацией NA61/SHINE [68] при $\sqrt{s} = 6.3, 12.3$, and 17.3 ГэВ. Экспериментальные данные были отобраны с помощью триггера минимального смещения (Minimum-Bias Trigger). Моделирование также проводилось с конфигурацией для событий с минимальным смещением. Данные эксперимента NA61/SHINE не были скорректированы на слепые зоны аксептанса в исследуемой области импульсов и быстройте. Вместо этого в результатах коллаборации учитывалась систематическая ошибка в 3–7%. Кроме того, в эксперименте исследовались частицы с $p_T < 1.5$ ГэВ.

Таблица 1. Значения модифицированных параметров физических моделей в МК-генераторе RUTHIA 8.306

Параметр	Вариант MB17	Стандартное значение	Комментарий
SigmaTotal:mode	3	1	Выбор ABMST параметризации ТПИУ сечений для p - p - и $p\bar{p}$ столкновений
SigmaDiffractive:ABMSTmodeSD	3	1	Выбор модифицированной ABMST параметризации
SigmaDiffractive:ABMSTmultSD	0.75	1.0	Масштабирующий фактор для ОД событий
SigmaDiffractive:ABMSTdampenGap	on	on	Этот параметр позволяет включить подавление дифракционных событий с малым разрывом по быстроте
SigmaDiffractive:ABMSTygap	1.0	2.0	Интервал подавления событий с разрывом по быстроте $ y < ABMSTygap$
MultipartonInteractions:pT0Ref	2.28	2.28	$p_{\perp 0}$ при $\sqrt{s} = 7$ ТэВ
MultipartonInteractions:ecmPow	0.152	0.215	Показатель степени для параметризации $p_{\perp 0}$, дающий $p_{\perp 0} = 0.92$ ГэВ при $\sqrt{s} = 17.3$ ГэВ
StringFlav:probStoUD	0.165	0.217	Фактор подавления s -кварков по отношению к u и d
StringFlav:probQQtoQ	0.034	0.081	Фактор подавления дивкварков по отношению к ккваркам.
StringPT:sigma	0.29	0.335	Дисперсия p_T , получаемого фрагментами при разрыве струны
BeamRemnants:remnantMode	1	0	Модель ОИА
ColourReconnection:mode	1	0	Выбор модели цветового пересоединения
BeamRemnants:primordialKTsoft	0.6	0.9	σ первоначального k_T в приближении мягких взаимодействий
BeamRemnants:primordialKTremnant	0.3	0.4	σ первоначального k_T для ОИА партонов

На рис. 11 показаны двухчастичные корреляционные функции для стабильных заряженных частиц с $p_T < 1.5$ ГэВ, полученные из имеющихся экспериментальных данных и с помощью исследуемых МК-генераторов при $\sqrt{s} = 6.3$ ГэВ. Для всех данных, как экспериментальных, так и полученных с помощью МК-моделей, наблюдается выпуклая структура при $\Delta\phi = \pi$ (область отдачи) и $\Delta\eta = 0$. Однако результаты для всех МК-моделей также демонстрируют явное увеличение количества корреляций при $\Delta\phi = \pi$ и $\Delta\eta > 3$, в то время как эта структура не может наблюдаться в данных из-за ограниченного диапазона быстрот в эксперименте NA61/SHINE. Рост корреляций в области отдачи

при $\Delta\eta > 3$ для всех исследованных МК-моделей связан, в основном, с присутствием в столкновении хотя бы одного протона. Стоит отметить, что для экспериментальных данных вдоль $\Delta\eta = 0$ наблюдается хребтообразная структура, которая воспроизводится не всеми МК-генераторами. Из рис. 11 видно, что SMASH 2.0.1, UrQMD 3.4 не могут качественно описать экспериментальные данные при $\Delta\phi = \pi$ и $\Delta\eta = 0$ при $\sqrt{s} = 6.3$ ГэВ, поскольку при использовании этих генераторов получается структура с двойной вершиной. При этом EPOS 3.4 и RUTHIA воспроизводят выпуклую корреляционную структуру в области отдачи.

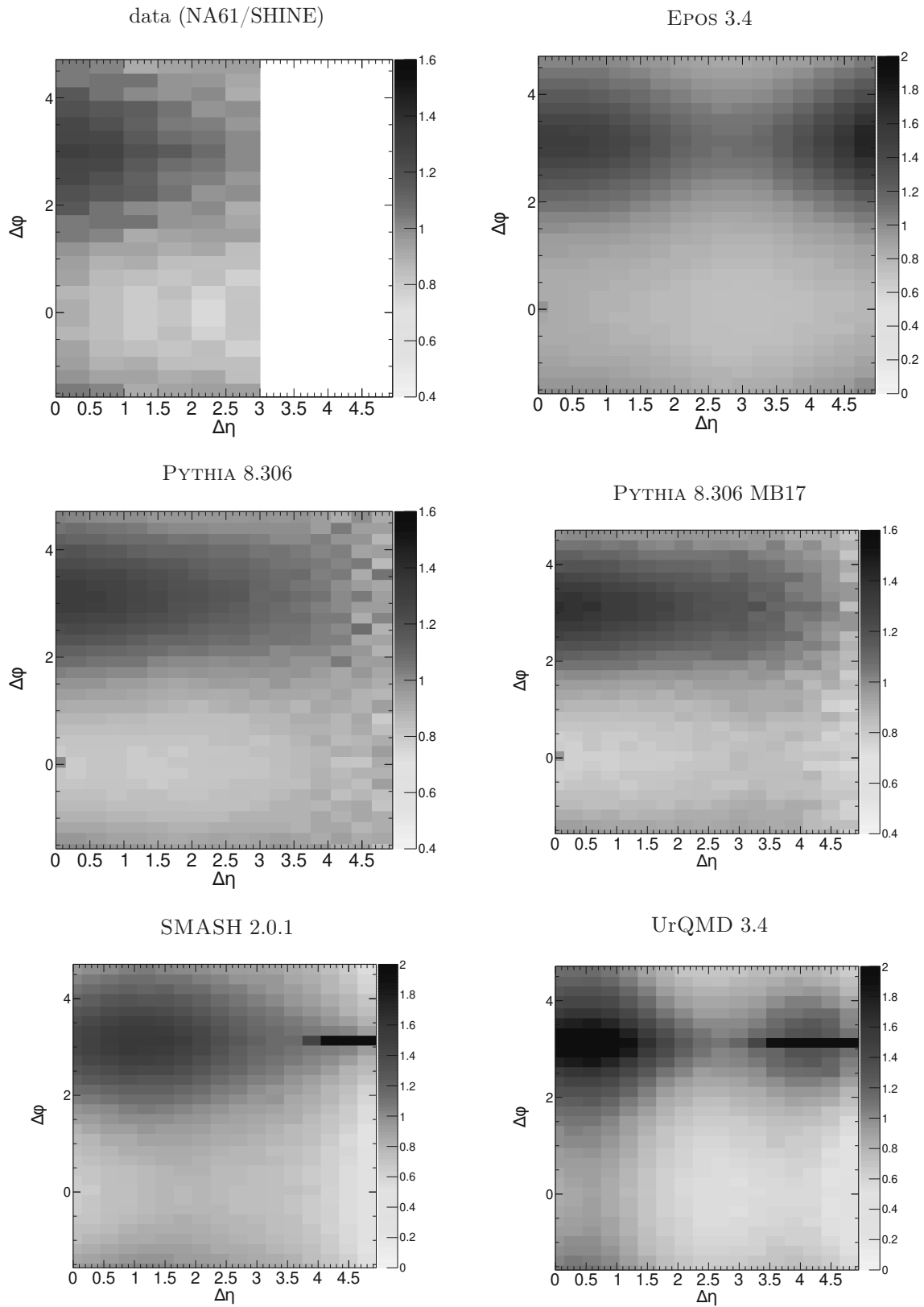


Рис. 11. Двухчастичные корреляционные функции $C(\Delta\eta, \Delta\phi)$ для различных МК-генераторов и данных при $\sqrt{s} = 6.3$ ГэВ. Обе частицы должны иметь $p_T < 1.5$ ГэВ. Значения $C(\Delta\eta, \Delta\phi)$ имеют цветовую кодировку

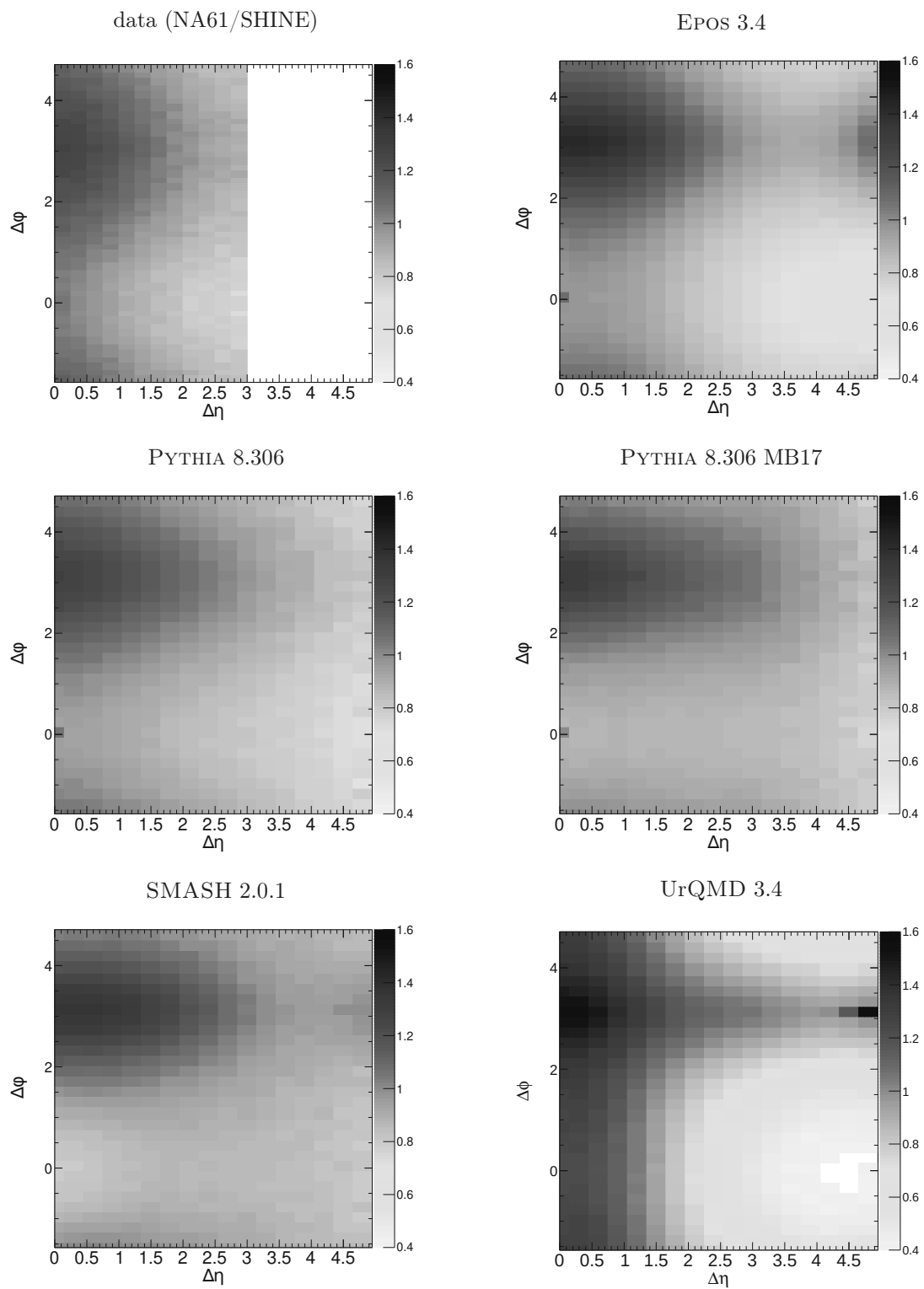


Рис. 12. Двухчастичные корреляционные функции $C(\Delta\eta, \Delta\phi)$ для различных МК-генераторов и данных при $\sqrt{s} = 12.3$ ГэВ. Обе частицы должны иметь $p_T < 1.5$ ГэВ. Значения $C(\Delta\eta, \Delta\phi)$ имеют цветовую кодировку

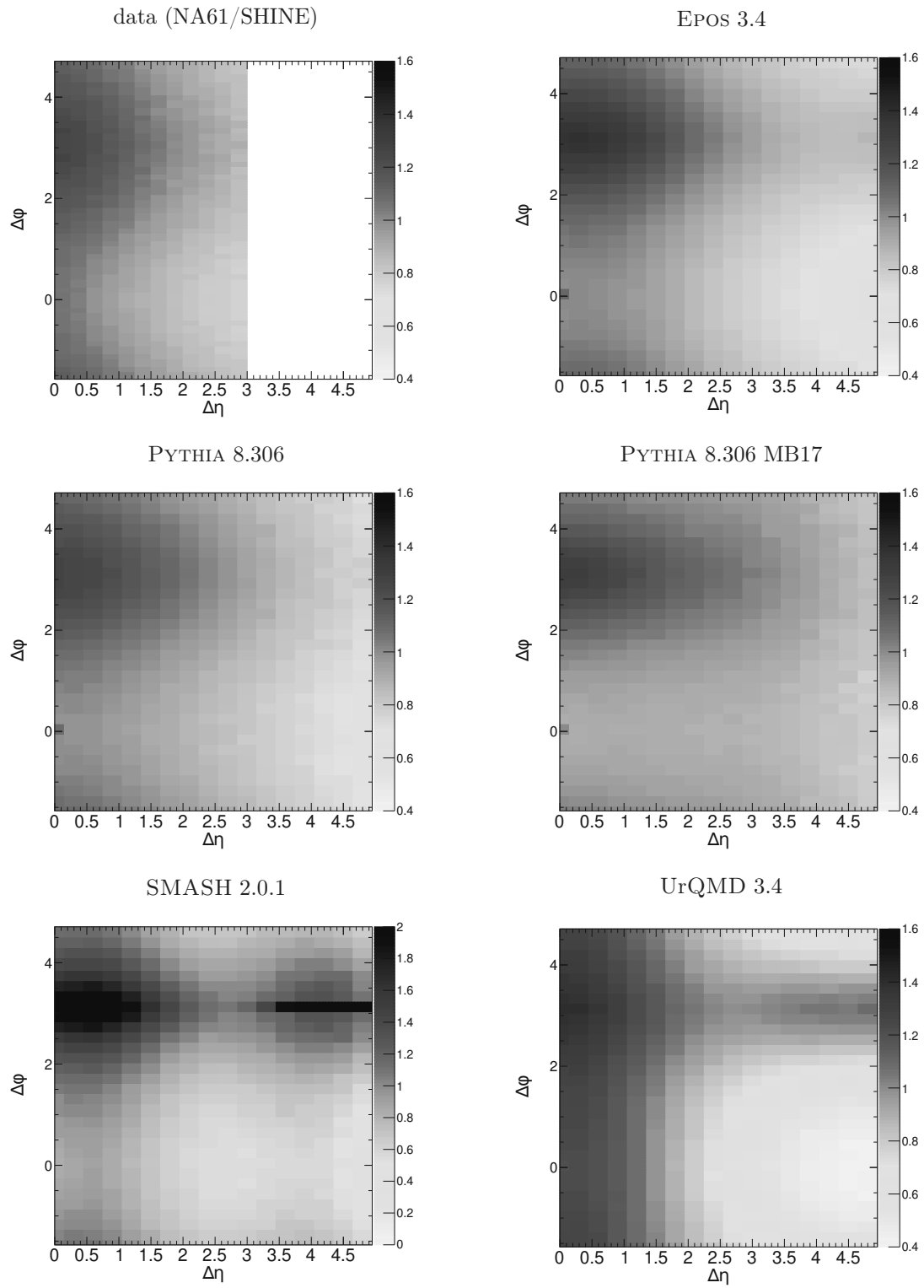


Рис. 13. Двухчастичные корреляционные функции $C(\Delta\eta, \Delta\phi)$ для различных МК-генераторов и данных при $\sqrt{s} = 17.3$ ГэВ. Обе частицы должны иметь $p_T < 1.5$ ГэВ. Значения $C(\Delta\eta, \Delta\phi)$ имеют цветовую кодировку

На рис. 12 показаны двухчастичные корреляционные функции для стабильных заряженных частиц с $p_T < 1.5$ ГэВ, полученные из имеющихся экспериментальных данных и с помощью исследуемых МК-генераторов при $\sqrt{s} = 12.3$ ГэВ. Главное отличие от случая с $\sqrt{s} = 6.3$ ГэВ состоит в том, что результаты для EPOS 3.4 и UrQMD 3.4 при $\Delta\eta = 0$ демонстрируют хребтообразные структуры, что означает, что при фрагментации струны рождается не менее трех частиц. Этот результат является ожидаемым, так как струны могут иметь большую массу при более высоком значении $\sqrt{s}$.

На рис. 13 показаны двухчастичные корреляционные функции для стабильных заряженных частиц с $p_T < 1.5$ ГэВ, полученные с помощью исследуемых МК-генераторов при $\sqrt{s} = 17.3$ ГэВ. При такой энергии столкновения хребтообразная структура при $\Delta\eta = 0$, как и следовало ожидать, усиливается, а структуры при $\Delta\eta = \pi$ и при больших псевдобыстроотах начинают выходить за пределы приведенного на рисунке η -диапазона. Отметим, что в результате использования МК-моделей вокруг $\Delta\phi = 0$ и $\Delta\eta = 0$ не создается никакой выпуклой структуры, что означает отсутствие рождения адронных струй при этой энергии.

Таким образом, для двухчастичных корреляционных функций можно заключить, что ни один генератор не может одновременно описать все характеристики корреляционной функции, измеренной в эксперименте NA61/SHINE. Некоторые генераторы даже не могут качественно описать ключевые области корреляций, а именно, PYTHIA, PYTHIA 8.306 и SMASH 2.0.1 не могут воспроизвести поведение данных при $\Delta\eta = 0$. Более того, UrQMD 3.4 и SMASH 2.0.1 дают неестественно резкие корреляции при $\Delta\eta > 3$ при $\Delta\phi = \pi$, в то время как EPOS 3.4 и PYTHIA 8.306 дают небольшой, но острый всплеск при $\Delta\phi = 0$ и $\Delta\eta = 0$. Как видно, настройка параметров PYTHIA, которая помогла значительно улучшить описание данных для распределений по быстрой для $p(\bar{p})$, $\pi^\pm$ и $K^\pm$ не оказалось полезной (скорее даже наоборот) для моделирования двухчастичных корреляционных функций.

К сожалению, относительно высокая погрешность (до 7%) в имеющихся экспериментальных данных делает количественное сравнение недостаточно информативным и в значительной степени ограничивает их применение для подгонки МК-генераторов. Тем не менее, можно ожидать существенного улучшения качества данных по двухча-

стичным корреляциям при низких энергиях в эксперименте MPD на NICA, поскольку их детектор обладает современными измерительными средствами и 4 π -геометрией.

4. ВЫВОДЫ

В настоящей работе проведено исследование соответствия результатов, полученных с использованием различных генераторов Монте-Карло, экспериментальным данным при энергиях NICA. А именно, с помощью генераторов EPOS 3.4, PYTHIA 8.306, UrQMD 3.4 и SMASH 2.0.1 были смоделированы столкновения протонов, а затем в смоделированных столкновениях были вычислены средние множественности, средний поперечный импульс, распределения по быстрой, двухчастичные корреляции при энергиях в системе центра масс $\sqrt{s}$ от ≈ 5 вплоть до 30 ГэВ. Результаты моделирования сравнивались с экспериментальными данными. Также предложен улучшенный набор параметров для PYTHIA 8.306 при $\sqrt{s} = 17.3$ ГэВ (версия с указанным набором обозначена как MB17).

Оказалось, что EPOS 3.4 неплохо описывает средние множественности $\pi^\pm$, $K^\pm$, $p(\bar{p})$ в сравнении с экспериментальными данными при исследуемых энергиях столкновений в системе центра масс. Стандартная версия PYTHIA 8.306 переоценивает значения множественности частиц, тогда как улучшенная версия PYTHIA 8.306 MB17 намного лучше описывает экспериментальные данные, практически в пределах погрешностей при $\sqrt{s} = 17.3$ ГэВ. UrQMD 3.4, SMASH 2.0.1 скорее недооценивают значения множественности исследуемых мезонов и антипротонов, при этом множественность протонов оказывается переоцененной. Данные распределения быстрой лучше всего описываются генератором EPOS 3.4 для всех исследуемых частиц. Стандартная версия PYTHIA 8.306 демонстрирует большие значения распределений в изучаемой области быстрой, особенно в области центральных быстрой. Версия PYTHIA 8.306 MB17 дает немного более широкие распределения для всех изучаемых мезонов и антипротонов по сравнению с экспериментальными данными. Полученное распределение протонов все еще немного уже, чем в имеющихся экспериментальных данных, однако все же значительно больше к ним приближено по сравнению со стандартной версией. UrQMD 3.4 и SMASH 2.0.1 недооценивают распределения для $\pi^\pm$ и $K^\pm$ во всей исследуемой области быстрой. Выход $p(\bar{p})$

описывается генераторами EPOS 3.4 и SMASH 2.0.1 только лишь в общих чертах. Результаты моделирования с помощью этих пяти генераторов дополнительно сравнивались с имеющимися экспериментальными данными по множественности K_S^0 , $K^*(892)$, $\bar{K}^*(892)$, ϕ , Λ , Ξ^- , $\bar{\Xi}^-$ при $\sqrt{s} = 17.3$ ГэВ. Было обнаружено, что разница между экспериментальными данными и результатами, полученными с помощью МК-моделирования, практически такая же, как для $\pi^\pm$, $K^\pm$, $p(\bar{p})$, т. е. для мезонов и барионов различия оказались аналогичными. Также с использованием разных генераторов были построены средние значения поперечного импульса $\pi^\pm$, $K^\pm$, $p(\bar{p})$. Разброс результатов достигает 25%.

Исследование двухчастичных угловых корреляции выявили тот факт, что каждый из исследуемых генераторов демонстрирует специфические свойства, и ни один из них не описывает все характеристики экспериментальных данных одновременно. Более того, для EPOS 3.4, PYTHIA 8.306, PYTHIA 8.306 MB17 и UrQMD 3.4 характерны неестественные резкие структуры, которые не наблюдаются в экспериментальных данных.

В целом существующее понимание физики протон-протонных столкновений при рассматриваемых энергиях в лучшем случае неполное, и модели Монте-Карло нуждаются в существенном улучшении. В свете скорого запуска ускорителя NICA такая ситуация требует фактически незамедлительной реакции от соответствующих специалистов. В данной работе предложен улучшенный набор параметров для генератора PYTHIA 8.306, с помощью которого можно существенно лучше описывать имеющиеся экспериментальные данные при $\sqrt{s} = 17.3$ ГэВ. Этот набор параметров также лучше описывает экспериментальные данные и при других энергиях столкновений, доступных NICA. Разумеется, данную модификацию нельзя считать окончательной, так как она получена для довольно небольшого числа наблюдаемых, и мы не нашли такого набора параметров, который бы устранил все различия между экспериментальными данными и результатами, полученными с помощью генераторов. В частности, не удалось добиться полного описания распределений по быстроте для протонов так, чтобы это не испортило остальные распределения. Еще более сложной задачей является описание двухчастичных корреляций.

Следует отметить, что в данный момент активно проводятся исследования в тех областях, к которым относится данная работа. В частности, разработка генератора PYTHIA продвигается в направле-

нии включения адронного перерасcеяния и прямого взаимодействия адронов низких энергий [69], что важно для моделирования на энергиях NICA, как для протонной, так и для тяжело-ионной программы. Активно развивается генератор SMASH [20]. Команда в Дубне работает над своей каскадной моделью [70].

В контексте данного исследования эксперимент MPD на NICA представляет наибольший интерес, так как имеет покрытие практически в 4π стерадиан и будет обладать современным разнообразным оборудованием для детектирования частиц и техникой реконструкции, что позволит значительно улучшить точность измерений многих величин.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект N 18-02-40131.

ЛИТЕРАТУРА

1. V. Kekelidze et al., Eur. Phys. J. A **52**, 211 (2016).
2. V. Golovatyuk et al., Eur. Phys. J. A **52**, 212 (2016).
3. *Spin Physics Detector*, <http://spd.jinr.ru/> (2023).
4. 57th Meeting of the PAC for Particle Physics, <https://indico.jinr.ru/event/3370/> (2023).
5. J. Randrup and J. Cleymans, Phys. Rev. C **74**, 047901 (2006).
6. A. Andronic, P. Braun-Munzinger, and J. Stachel, Phys. Lett. B **673**, 142 (2009).
7. M. Antinucci et al., Lettere al Nuovo Cimento (1971-1985) **6**, 121 (1973).
8. A. Rossi et al., Nuclear Physics B **84**, 269 (1975).
9. N49 Collaboration Eur. Phys. J. C **45**, 343 (2006).
10. NA61/SHINE Collaboration, Eur. Phys. J. C **77**, 671 (2017).
11. V. Kolesnikov et al., Phys. Part. Nucl. Lett. **17**, 142 (2020).
12. G. Pancheri and Y. N. Srivastava, Eur. Phys. J. C **77**, 150 (2017).

13. T. Sjöstrand, S. Mrenna, and P. Z. Skands, JHEP **05**, 026 (2006).
14. T. Sjöstrand et al., Comput. Phys. Commun. **191**, 159 (2015).
15. K. Werner et al., Phys. Rev. C **85**, 064907 (2012).
16. K. Werner et al., Phys. Rev. Lett. **112**, 232301 (2014).
17. M. Bleicher et al., J. Phys. G **25**, 1859 (1999).
18. S. Bass et al., Progress in Particle and Nuclear Physics **41**, 255 (1998).
19. J. Weil et al., Phys. Rev. C **94**, 054905 (2016).
20. J. Mohs, S. Ryu, and H. Elfner, J. Phys. G **47**, 065101 (2020).
21. L. Lönnblad, Nucl. Phys. A **1005** 121873 (2021).
22. S. Ostapchenko, Nuclear Physics B – Proc. Suppl. **151**, 143 (2006).
23. A. Fedynitch and R. Engel, Proc. of the 14th Int. Conf. on Nuclear Reaction Mechanisms, (2015), p. 291.
24. E.-J. Ahn et al. Phys. Rev. D **80**, 094003 (2009).
25. M. Bähr et al., Eur. Phys. J. C **58**, 639 (2008).
26. J. Bellm et al., Eur. Phys. J. C **76**, 196 (2016).
27. Sherpa Manual, <https://sherpa.hepforge.org/doc/SHERPA-MC-2.1.1.html>.
28. G. A. Schuler and T. Sjostrand, Phys. Rev. D **49**, 2257 (1994).
29. A. Donnachie and P. V. Landshoff, Phys. Lett. B **296**, 227 (1992).
30. R. B. Appleby et al., Eur. Phys. J. C **76**, 520 (2016).
31. C. O. Rasmussen and T. Sjöstrand, Eur. Phys. J. C **78**, 461 (2018).
32. T. S. strand and P. Skands, J. High Energy Phys. **2004**, 053 (2004).
33. A. Ortiz, G. Bencédi, and H. Bello, J. Phys. G **44**, 065001 (2017).
34. G. Mao, Z. Li, and Y. Zhuo, Phys. Rev. C **53**, 2933 (1996).
35. W. J. Fickinger et al., Phys. Rev. **125**, 2082 (1962).
36. J. T. Reed et al., Phys. Rev. **168**, 1495 (1968).
37. M. Firebaugh et al., Phys. Rev. **172**, 1354 (1968).
38. R. I. Louttit et al., Phys. Rev. **123**, 1465 (1961).
39. E. Bierman, A. P. Colleraine, and U. Nauenberg Phys. Rev. **147**, 922 (1966).
40. G. Alexander et al., Il Nuovo Cimento A (1965-1970) **53**, 455 (1968).
41. W. J. Hogan, P. A. Piroué, and A. J. S. Smith, Phys. Rev. **166**, 1472 (1968).
42. G. Alexander et al., Phys. Rev. **154**, 1284 (1967).
43. P. Aahlin et al., Physica Scripta **21**, 12 (1980).
44. U. Amaldi et al., Nuclear Physics B **86**, no. 3, 403 (1975).
45. V. Blobel et al., Nuclear Physics B **69**, 454 (1974).
46. H. Fesefeldt et al., Nuclear Physics B **147**, 317 (1979).
47. J. Allday et al., Zeitschrift für Physik C **40**, 29 (1988).
48. M. Asa et al., Zeitschrift für Physik C **27**, 11 (1985).
49. R. Eisner et al., Nuclear Physics B **123**, 361 (1977).
50. J. Chapman et al., Physics Letters B **47**, 465 (1973).
51. H. Boggild et al., Nuclear Physics B **57**, 77 (1973).
52. C. W. Akerlof et al., Phys. Rev. D **3**, 645 (1971).
53. E. E. Zabrodin et al., Phys. Rev. D **52**, 1316 (1995).
54. V. Ammosov et al., Nuclear Physics B **115**, 269 (1976).
55. M. Alston-Garnjost et al., Phys. Rev. Lett. **35**, 142 (1975).
56. D. Brick et al., Nuclear Physics B **164**, 1 (1980).

57. K. Jaeger et al., Phys. Rev. D **11**, 2405 (1975).
58. F. LoPinto et al., Phys. Rev. D **22**, 573 (1980).
59. A. Sheng et al., Phys. Rev. D **11**, 1733 (1975).
60. R. D. Kass et al., Phys. Rev. D **20**, 605 (1979).
61. N49 Collaboration, Eur. Phys. J. C **45**, 343 (2006).
62. A. Laszlo, Nuclear Physics A **830**, 559c (2009).
63. H. G. Fischer et al., Eur. Phys. J. C **82**, 875 (2022).
64. T. Matulewicz and K. Piasecki, [arXiv:2103.05355](#).
65. V. Uzhinsky, [arXiv:1404.2026](#).
66. V. Uzhinsky and A. Galoyan, Phys. Rev. D **91**, 037501 (2015).
67. K. Eggert et al., Nucl. Phys. B **86** 201 (1975).
68. NA61/SHINE Collaboration, Eur. Phys. J. C **77**, 59 (2017).
69. T. Sjöstrand and M. Uthman, Eur. Phys. J. C **80**, 907 (2020).
70. M. Baznat et al., Physics of Particles and Nuclei Lett. **17**, 303 (2020).

КИНЕТИКА РОСТА КВАНТОВЫХ КРИСТАЛЛОВ ^4He ПРИ ТЕМПЕРАТУРЕ 0.1–0.2 К

Р. Б. Гусев^{a*}, В. Л. Цымбаленко^b

^a *Институт физических проблем им. П. Л. Капицы Российской академии наук
119334, Москва, Россия*

^b *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 30 марта 2023 г.,
после переработки 8 июня 2023 г.
Принята к публикации 19 июня 2023 г.

Исследована кинетика роста кристаллов ^4He , зарожденных в метастабильной жидкости при пересыщениях до 10 мбар, в интервале температур 90–180 мК. Наблюдение за ростом кристаллов и кино съемка проводились в оптическом криостате растворения. Определено граничное пересыщение, разделяющее области нормального (медленного) и аномального (быстрого) роста. Измерена скорость роста граней кристаллов в режиме нормального роста. Исследована кинетика быстрого роста кристаллов в зависимости от пересыщения и температуры.

DOI: 10.31857/S0044451023110056

EDN: PNJPQQ

1. ВВЕДЕНИЕ

Кинетика роста кристаллического гелия привлекла внимание исследователей после теоретического предсказания [1] и экспериментального наблюдения [2] ее квантового характера, см. обзор [3]. Специфика роста наблюдалась на атомно-шероховатых поверхностях. Движение делокализованных ступеней — элементарных дефектов поверхности кристалла, обеспечивало высокую скорость роста поверхности, увеличивающуюся с понижением температуры. Кинетика же роста граней кристалла, несмотря на квантовый характер движения ступеней, оставалась низкой, определяемой наличием ростовых дефектов в соответствии с хорошо установленными в кристаллографии механизмами [4]. В отсутствие дефектов скорости роста граней были близки к нулю [5]. Температурный ход кинетики a - и c -граней определяется механизмами спирального роста и источника Франка–Рида и имеет немонотонный характер. При понижении температуры ниже перехода ограничения скорости уменьшались вследствие увеличения линейной энергии ступеней. Подвижность же

ступеней, как отмечено выше, монотонно возрастает при понижении температуры. Комбинация этих механизмов дает немонотонный характер скорости роста граней от температуры [6, рис. 4]. Отметим, что все указанные экспериментальные результаты были получены при пересыщениях, не превышающих 0.2 мбар.

Неожиданным оказалось наблюдение скачкообразного возрастания скорости роста граней на несколько порядков с понижением температуры [7, 8]. Оказалось, что характер роста кристалла определяется начальным пересыщением p_0 , при котором образовывался кристалл. Ниже этой величины кристалл рос медленно (нормальный рост). Значения скоростей роста граней согласовывались с известными механизмами и данными измерений. Выше порогового пересыщения скорости роста граней всех кристаллографических ориентаций возрастали настолько, что в контейнере возбуждались акустические колебания, проявляющиеся в осциллирующем росте кристалла (аномальный рост). К настоящему времени построена фазовая диаграмма, демонстрирующая области нормального и аномального роста в координатах T – p_0 ; определена температурная зависимость граничного пересыщения $p_b(T)$, разделяющего эти области; измерены анизотропия и скорости аномального

* E-mail: tek@kapitza.ras.ru

роста граней до ~ 0.48 К в оптическом криостате и до ~ 0.18 К без визуального контроля; показан вероятностный характер образования аномального состояния и изучен возврат граней к нормальной кинетике, см. обзор [6]. К сожалению, вся совокупность данных так и не позволила прояснить физическую природу этого явления.

В данной работе исследовался свободный рост кристаллов, зарождаемых в метастабильной жидкости, с визуальным контролем процесса в области температур 90–200 мК.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ МЕТОДИКА

Эксперименты проводились в криостате, сконструированном С. Т. Болдаревым (ИФП РАН). Параметры рефрижератора растворения следующие: скорость циркуляции ^3He 100–300 мкмоль/с, минимальная температура 60 мК.

Наблюдения роста кристаллов в проходящем свете выполнялись в контейнере конструкции Болдарева, изображенной на рис. 1. На рисунке показан осевой разрез ячейки плоскостью, перпендикулярной оптической оси. Корпус ячейки (1) имеет форму прямоугольного параллелепипеда размерами $44 \times 36 \times 42$ мм³, на пяти гранях которого проточены посадочные места под фланцы на индиевом уплотнении. Внутренняя полость ячейки имеет форму ориентированного вдоль оптической оси цилиндра диаметром 34 и высотой 24 мм; верхний и два боковых фланца ячейки открыты в центральную зону через отверстия диаметром 21 мм. Светлый круг (3) в центре рисунка — оптическое окно, за которым расположена призма оптической системы (2) (квадрат 12.7×12.7 мм²). Окрашенное кольцо по периметру

прозрачной зоны — уплотняющий фланец окна. Расстояние от центра ячейки до ближайшей стенки (оптического окна) составляет 13.5 мм, до корпуса — 17 мм. Полный объем внутренней полости ячейки составляет 26 см³.

Ячейка была подвешена на медном каркасе к нижнему фланцу ванны растворения, а низкотемпературные компоненты оптической системы (конденсор входящего пучка, две призмы полного внутреннего отражения и линза, фокусирующая изображение на торец изображающего световода) — к радиационному экрану, находящемуся в тепловом контакте с ванной испарения рефрижератора ($T \approx 0.7$ К). Остальные элементы оптики — осветитель (светодиод) и камера для видеозаписи со своими фокусирующими линзами — находились вне криостата при комнатной температуре.

В левой части рис. 1 показан фланец с герметичными электрическими вводами, на которых смонтированы внутренний термометр ячейки (4) и игла нуклеатора (5) для инициации роста кристалла сильным электрическим полем. Термометром ячейки служил SMD-резистор на основе RuO_2 , отградуированный по калиброванному термометру фирмы LakeShore.

На правом боковом фланце размещены главный теплообменник (6) и входной патрубок (7) линии наполнения ячейки. Хвостовик медного корпуса теплообменника (6) связан холодопроводом из многожильного медного провода с дном ванны растворения. Для минимизации теплопритока к ячейке от гелиевой ванны криостата ($T = 4.2$ К) линия наполнения (7) была выполнена из тонкостенного (~ 60 мкм) капилляра внутренним диаметром ~ 120 мкм и оснащена дискретными теплообменниками на температурных уровнях ~ 1.4 К (откачиваемая гелиевая ванна), ~ 0.7 К (ванна испарения) и ~ 0.1 К (ванна растворения) рефрижератора.

Нижняя часть фланца (8) из бронзы БрБ2 толщиной 0.8 мм и диаметром 18 мм служит мембраной емкостного датчика давления. Второй неподвижный электрод датчика вклеен во фланец через изолятор (светлое кольцо на рис. 1) над мембраной с зазором ~ 50 мкм (на рис. 1 увеличен). Собственная резонансная частота мембраны датчика составила ~ 19 кГц, что позволяет регистрировать изменения давления в квазистатическом режиме с постоянной времени ~ 50 мкс.

Конденсатор, образованный мембраной датчика и корпусом ячейки, соединен со сверхпроводящей катушкой. Резонансный контур подсоединен слабой обратной связью к автогенератору. Изменение дав-

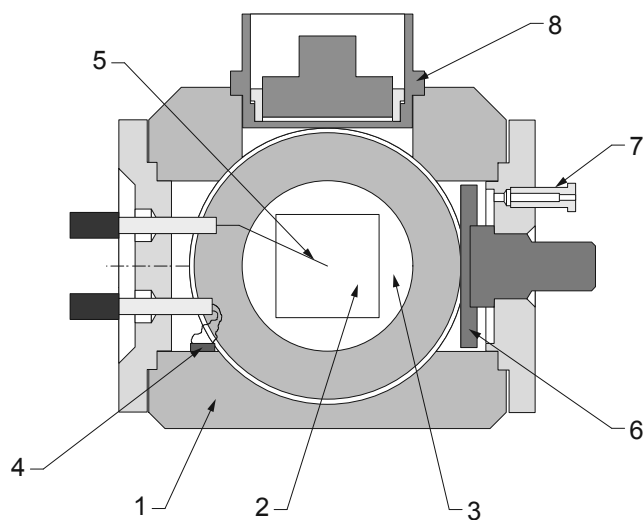


Рис. 1. Экспериментальная ячейка

ления на стенке контейнера в месте расположения мембраны датчика регистрировалось по изменению частоты автогенератора, генерировавшего сигнал на частоте 2.3 МГц. Сигнал генератора демодулировался девиометром СКЗ-39 и усиливался предусилителем с частотой среза фильтра низких частот 1 и 3 кГц. Итоговый сигнал регистрировался с шагом 10 мкс, длина записи составляла $2 \cdot 10^5$ точек. Измеренная чувствительность датчика давления на кривой плавления составила 18 кГц/бар, стабильность ~ 20 Гц/ч. Среднеквадратичные шумы измерения давления, как видно из рис. 2, составляют ~ 0.013 мбар.

Для получения необходимых пересыщений использовалось поддавливание ^4He из внешнего балластного объема 300 см^3 путем его нагрева. Максимальное пересыщение, достигнутое в данном контейнере, ограничивалось спонтанным зародышеобразованием на стенке и составляло 15 мбар. Для зарождения кристалла на кончике иглы нуклеатора, расположенной в центре ячейки, использовалось дополнительное электростатическое давление, создаваемое сочетанием постоянного высокого напряжения и дополнительного импульса напряжения длительностью ~ 30 мкс.

2.1. Обработка данных аномального и нормального роста

Пример записей показаний датчика давления в ячейке в процессе роста кристаллов приведен на рис. 2. Пересыщение в контейнере уменьшается от стартового p_0 (в момент зарождения кристалла) до давления фазового равновесия $p = 0$. Постоянная времени обмена гелием между внешним объемом и контейнером много больше времени роста кристалла. Поэтому рост кристалла происходит при постоянной массе гелия в контейнере.

Система инерционная, скорости роста давления в контейнере находятся в диапазоне 0.37 ± 0.13 мбар/с. За время аномального роста кристалла ~ 3 мс масса гелия в контейнере увеличивается не более чем на 0.1%. С этой точностью кристалл растет при постоянной массе.

При медленном росте кристалла градиенты давления и температуры в ячейке малы. Поэтому значение пересыщения $p(t)$, измеренное емкостным датчиком давления на стенке контейнера, равно пересыщению на границе раздела фаз. Из постоянства массы гелия в контейнере следует, что объем кристалла однозначно определяется ходом $p(t)$:

$$V_{\text{cryst}}(t) = V_0 \frac{\rho_l}{\Delta \rho} k_l [p_0 - p(t)]. \quad (1)$$

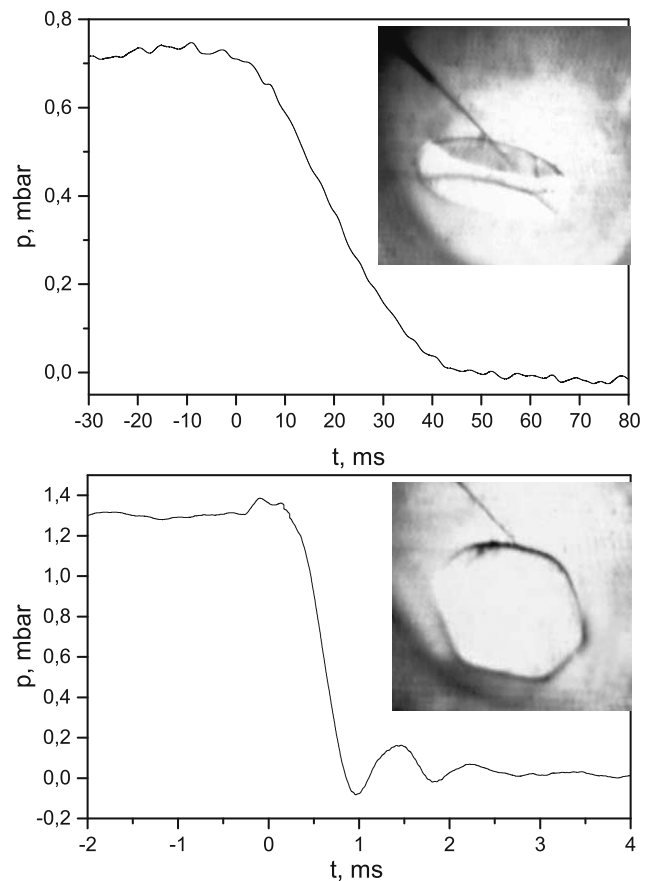


Рис. 2. Записи падения давления в контейнере: в процессе нормального (вверху) и аномального (внизу) роста кристалла. Импульс, порождающий кристалл в метастабильной жидкости, приложен в момент $t = 0$. Температура 178 мК. Фотографии сделаны по завершении роста

Здесь V_0 — внутренний объем контейнера, k_l — сжимаемость жидкого гелия, ρ_l и ρ_s — плотности соответственно жидкой и твердой фаз, $\Delta \rho = \rho_s - \rho_l$. Определение усредненного кинетического коэффициента роста выполнялось со следующими упрощениями. Принимался изотропный рост кристалла, поскольку, как видно из рис. 2 (вверху), анизотропия роста a - и c -граней невелика. Из этого предположения по значению объема кристалла $V_{\text{cryst}}(t)$ вычислялся радиус сферы R_{fin} по завершении роста. Полное время роста t_{growth} определялось по записи $p(t)$ как отношение p_0 к производной dp/dt , измеренной на середине кривой падения давления при $p = p_0/2$. Усредненная таким образом скорость роста определялась соотношением $v = R_{\text{fin}}/t_{\text{growth}}$. Кинетический коэффициент роста K вычислялся по формуле

$$v = K \frac{\Delta \rho}{\rho_l \rho_s} \frac{p_0}{2}. \quad (2)$$

В случае anomalно быстрого роста кристалла в жидкости возбуждаются акустические колебания. Давление, измеряемое датчиком на стенке контейнера, в этом режиме не соответствует пересыщению на границе раздела фаз. Для количественной оценки скорости роста кристаллов использовалась упрощенная модель: рост сферического кристалла в центре сферического контейнера. Анизотропность акустического поля на границе кристалла не учитывалась. Уравнения роста кристалла радиуса r_0 в ячейке радиуса R (где $r_0 \ll R$) в идеальной жидкости имеют вид [9]

$$\Delta\phi - \frac{1}{c_l^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = 0, \quad u = \nabla\phi, \quad p = -\rho_l \frac{\partial\phi}{\partial t} \quad (3)$$

с граничными условиями

$$u_r(R) = 0, u_r(r_0) = -K \left(\frac{\Delta\rho}{\rho_l} \right)^2 \frac{p(r_0)}{\rho_s},$$

где ϕ — потенциал скорости u жидкости, c_l — скорость звука в жидкости, p — давление, отсчитанное от давления фазового равновесия.

Из предыдущих измерений и непосредственной съемки роста кристалла [10] известно, что на этапе роста кристалла от момента зарождения до достижения максимального размера его форма изменяется пропорционально, подобным образом. Падение давления в контейнере на этом временном отрезке определяется исключительно кинетикой роста граней. После того как кристалл вырастает от нулевого до максимального размера, начинается его плавление; далее размер осциллирует в процессах роста–плавления, а форма теперь определяется кинетикой всех участков поверхности, в том числе и атомно-шероховатых. Эти вклады учесть трудно, поэтому обрабатывался только первый полупериод колебаний давления в контейнере.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

3.1. Области нормального и anomalного роста

Рисунок 3 показывает, что в изученной области, как и при более высоких температурах, характер роста кристалла определяется начальным пересыщением p_0 . Сравнение данных по граничным пересыщениям p_b , разделяющим области нормального и anomalного роста, следует проводить с учетом того факта, что образование anomalного состояния происходит в течение некоторого времени под воздействием избыточного давления и имеет вероятност-

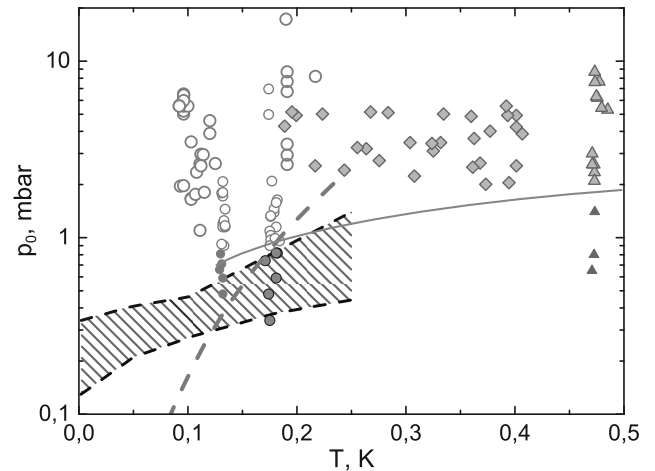


Рис. 3. Рост кристаллов при различных стартовых пересыщениях. Сплошными символами изображены кристаллы, грани которых демонстрировали нормальную, медленную, кинетику роста, пустые символы — кристаллы с anomalным, быстрым, ростом. Треугольники — результаты [9], ромбы — [12], кружки — наши измерения. Заштрихованная полоса показывает область, в которой происходило 80% событий anomalного роста из работ [5, 11]. Сплошная кривая разделяет области нормального и anomalного роста для экспериментов со свободно растущими кристаллами. Штриховая кривая отображает границу пересыщений, выше которой начинается кинематическое размножение ступеней на гранях [14, 15]

ный характер, см. рис. 9 и 10 в работе [6]. Чем продолжительнее воздействие пересыщения, тем при меньших его значениях может произойти взрывной рост. На рис. 3 для результатов работ [5, 11] это проиллюстрировано заштрихованной полосой, в которую укладывается 80% наблюдаемых скачков скорости роста, причем время воздействия избыточного давления составляло десятки секунд. В наших же экспериментах это время было на порядок меньше, т. е. следовало ожидать более высоких значений граничного пересыщения. С учетом этого замечания рис. 3 демонстрирует качественное согласие значений p_b для кристаллов, не содержащих ростовых дефектов [5, 11], и свободно растущих кристаллов со значительной ($\sim 10^5 \text{ см}^{-2}$) концентрацией ростовых дефектов [6].

Выполненные ранее эксперименты в непрозрачном контейнере [12], результаты которых также приведены на рис. 3, позволяли оценить только верхний предел граничного пересыщения для диапазона температур 0.2–0.4 К как $p_b \leq 2$ мбар; эта оценка хорошо согласуется с измеренным нами значением $p_b = 0.8\text{--}0.9$ мбар при $T \simeq 130$ и 180 мК.

3.2. Нормальный рост

Форма кристаллов по завершении нормального роста соответствует гексагональной симметрии решетки ^4He . Сразу после основного сброса давления, как правило, размер c -граней больше размера a -граней, что позволяет оценить анизотропию скорости роста отношением $K_c : K_a = 1 : (2-4)$, характерным и для роста кристаллов выше 0.4 К. Дальнейшее подрачивание кристалла в некоторых случаях приводит к существенному изменению формы за счет более быстрого роста c -границ («карандашная» форма), что говорит о больших скоростях роста базисной грани при малых, менее 0.01 мбар, пересыщениях. Подробные измерения в этом режиме не проводились.

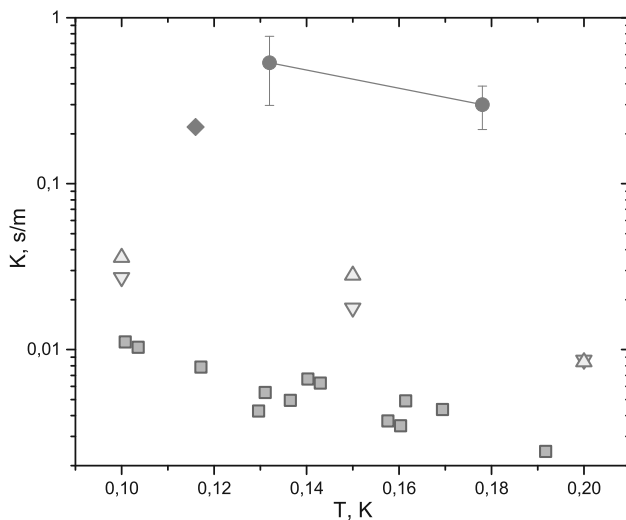


Рис. 4. Зависимость кинетического коэффициента нормального роста от температуры. Квадраты — результаты [13] для a -грани, треугольники — результаты [5, 11] для a - и c -граней, сплошные кружки — наши результаты. Ромбом обозначен коэффициент, определенный по кинетике падения, см. разд. 4.3

Скорости роста граней и их зависимости от температуры качественно согласуются с ранее измеренными. На рис. 4 показано сопоставление данных результатов с результатами, полученными в работах [5, 11, 13] при пересыщениях менее 0.2 мбар. В опытах [13] удалось измерить скорость роста только a -грани: подвижность c -границ была ниже возможностей методики. В экспериментах [5, 11] подток жидкости в контейнер вызывал рост граней со скоростями, достаточными для компенсации поступавшей массы. Пересыщение, которое устанавливалось, соответствовало этой скорости, зависело от мобильности грани и лежало в интервале от ~ 10 мкбар при самых низких температурах ~ 2 мК до ~ 200 мкбар

при температурах ~ 250 мК. Отметим, что во всех случаях скорость роста граней нелинейно зависела от пересыщения и имела положительную кривизну. Рост кристаллов в данных экспериментах, как видно из рис. 2, проходил при стартовом давлении, превышающем величины пересыщений в экспериментах [5, 11, 13] примерно на порядок.

Нам не удалось наблюдать медленный рост кристалла при 100 мК; для ближайшей температурной точки 0.13 К наша оценка усредненного коэффициента нормального роста составляет $K \approx 0.6$ с/м (рис. 4).

3.3. Аномальный рост

Кристаллы, образовавшиеся в режиме быстрого роста, имеют форму гексагональной пластинки, как и кристаллы, выросшие ниже граничного пересыщения, см. рис. 2 ($T = 178$ мК) и фотографию на рис. 5. Левая кривая на рис. 5 — экспериментальная запись зависимости давления в контейнере от вре-

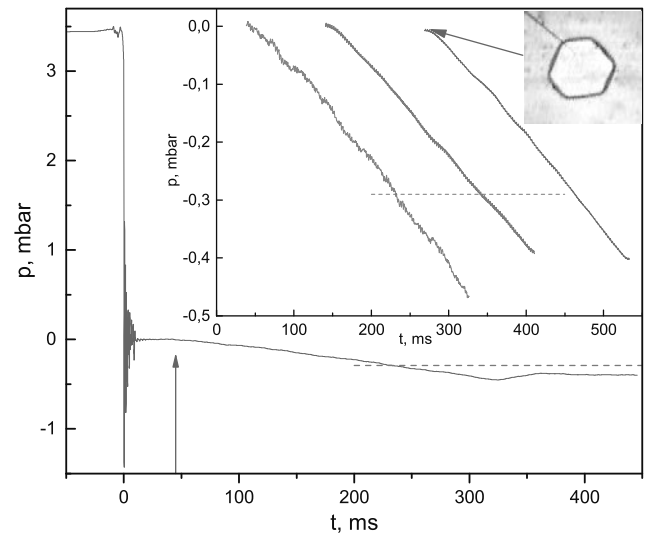


Рис. 5. Изменение давления в контейнере при росте кристалла при температуре 116 мК. Вследствие anomalно высокой кинетики роста граней кристалла, возникшего при стартовом пересыщении 3.5 мбар, давление быстро уменьшается и после нескольких осцилляций устанавливается равным давлению фазового равновесия. Через время 45 мс, отмеченное вертикальной стрелкой, кристалл начинает падение на дно, что сопровождается уменьшением показаний датчика давления. После падения давление релаксирует к равновесному в этом положении. На вставке показаны изменения давления для кристаллов, образовавшихся при различных стартовых пересыщениях. Штриховая горизонталь отмечает значение, соответствующее разности гидростатических давлений между концом иглы и дном контейнера

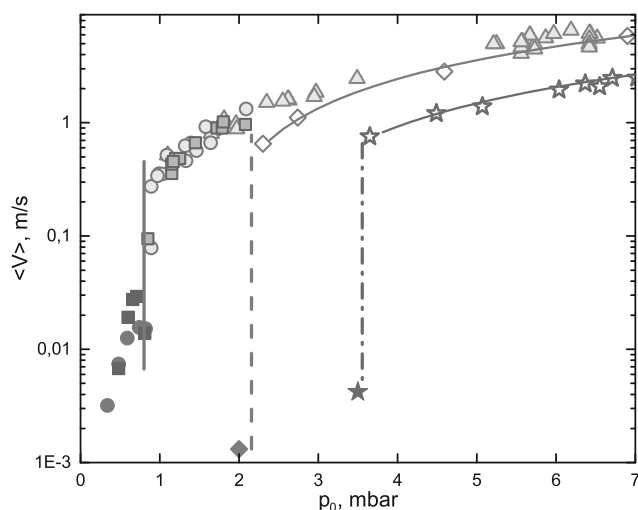


Рис. 6. Усредненная скорость роста кристалла в зависимости от начального пересыщения. Кружки, квадраты и треугольники — результаты для температур 178, 131 и 96 мК соответственно. Ромбы и звезды — данные при температурах 484 и 639 мК [9]. Сплошные символы относятся к медленному росту кристаллов, пустые — к быстрому. Сплошная вертикальная линия обозначает пересыщение, разделяющее области нормального и аномального роста, полученное в данном эксперименте, см. рис. 3. Штриховая и штрихпунктирные линии разделяют области нормального и быстрого роста при температурах 484 и 639 мК

мени с разрешением 25 мкс в процессе зарождения, роста и дальнейшей эволюции одного из образцов ($T = 116$ мК). Отсчет времени ведется с начала резкого падения давления от начального пересыщения.

На рис. 6 приведены значения кинетического коэффициента роста K , полученные в результате обработки осциллирующего роста кристаллов в аномальной области при температурах 92–186 мК и пересыщениях ≤ 7 мбар. Видна тенденция уменьшения подвижности граней по мере приближения к граничному пересыщению. Это согласуется с измерениями K при более высоких температурах 0.48–0.64 К [9]. При незначительном уменьшении начального пересыщения рождаются кристаллы с нормальной скоростью роста, что, как видно из графика, приводит к резкому замедлению кинетики граней.

3.4. Изменение давления при переплавлении кристалла на игле и падении на дно контейнера

За время ~ 3 мс осцилляции затухают и кристалл достигает максимального размера. Давление в контейнере приходит к давлению фазового равновесия. На эволюцию кристалла влияние теперь оказывает градиент гидростатического давления. В ре-

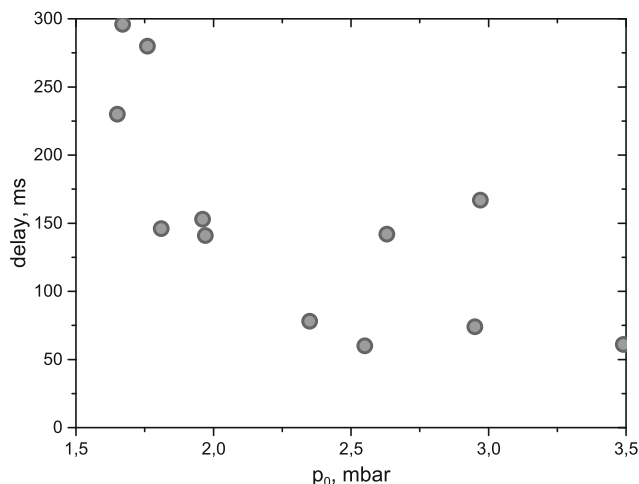


Рис. 7. Зависимость времени удержания кристаллов на нуклеаторе от начального пересыщения, при котором зародился кристалл. Температура в интервале 92–116 мК

зультате кристалл плавится наверху и подрастает снизу, что выглядит как его сползание вниз вплоть до полного отрыва от нуклеатора и падения на дно контейнера. Пока кристалл «висит» на острие нуклеатора, давление на датчике изменяется незначительно, рис. 5.

Время задержки кристаллов на игле определялось непосредственно из кривой $p(t)$. Момент схода кристаллов с иглы был хорошо различим как скачок производной $dp/dt \sim -1$ мбар/с. На рис. 7 представлена зависимость времени удержания на нуклеаторе от начального пересыщения p_0 для серии образцов при минимальных температурах 92–116 мК. Видна тенденция к росту задержки с уменьшением размера кристалла.

Уменьшение давления в контейнере во время падения кристалла однозначно свидетельствует об увеличении его объема. Отметим, что минимальное давление по завершении падения отличается от разности гидростатических давлений между острием и дном контейнера, отмеченной на рис. 5 штриховой горизонтальной. Затем наблюдается релаксация давления к этому значению.

4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

4.1. Нормальный рост

Результаты по зависимости кинетического коэффициента роста K от температуры качественно согласуются с результатами работ [5, 6, 15]. Понижение температуры увеличивает скорость роста граней. Однако полученные численно усредненные зна-

чения K примерно на порядок больше. Это различие может быть объяснено рядом факторов.

1. Спиральный рост граней.

Грани кристалла растут за счет топологических дефектов, таких как ступени на месте выхода винтовых дислокаций — спиральный рост и источники Франка–Рида. Эти механизмы обеспечивают нелинейную зависимость скорости роста от пересыщения. В классическом случае скорость спирального роста пропорциональна квадрату пересыщения, $V \sim p^2$. Пересыщение в работе [15] создавалось столбом жидкости высотой 3.5–5 мм, что соответствует $p = 0.06$ – 0.085 мбар. В работах [5, 6] измерения при температурах 0.1–0.15 К проводились до значений $p = 0.05$ – 0.09 мбар соответственно. Наши результаты по нормальному росту получены при значениях пересыщений в диапазоне 0.5–2 мбар (рис. 6, сплошные символы).

Вследствие нелинейной зависимости $V(p)$ величины скоростей спирального роста граней кристалла в данном случае должны значительно превышать скорости роста в экспериментах [5, 6, 15]. Линейная аппроксимация усредненной скорости роста граней кристалла по формуле (2) тогда даст завышенные значения K .

2. Кинематическое размножение ступеней.

Скорость роста кристаллической грани определяется концентрацией и подвижностью линейных дефектов поверхности — ступеней. Спиральный рост грани определяется фиксированным количеством источников роста. При низких температурах начинает играть роль механизм, увеличивающий концентрацию ступеней, и за счет этого возрастает скорость роста граней. Свободнодвигающиеся ступени противоположного знака при столкновении аннигилируют и могут создать пару ступеней в следующем кристаллическом слое, т. е. служить источником роста. Этот и подобные сценарии рассмотрены в работах [14, 15].

В области, находящейся выше штриховой кривой на рис. 3, сопротивление движению ступени мало и начинается их кинематическое размножение. Видно, что интервал пороговых пересыщений, необходимый для начала функционирования этого механизма, близок к значениям пересыщений в данных измерениях. Приведенная на графике граничная кривая рассчитана по параметрам, известным для ступеней на c -грани. В работе [15] отмечено, что механизм кинематического размножения ступеней также эффективен для системы a -граней.

3. Вклад аномальной кинетики в процесс нормального роста.

Исследования характера перехода кинетики роста грани от аномальной к нормальной показали новые черты этого процесса [16, 17]. При медленном росте, происходящем при стартовом пересыщении p_0 в области ниже кривой, разделяющей области нормального и аномального роста, см. рис. 3, наблюдаются кратковременные переходы в аномальное состояние с высокой скоростью роста. Усредненные значения скорости роста граней кристалла увеличиваются за счет этих скачков. Подобные скачки наблюдаются и при нормальном росте, когда пересыщения, приложенные к кристаллу с нормальной кинетикой роста, значительно ниже пересыщений, ограниченных кривой на рис. 3.

Наблюдение кратковременных переходов кинетики граней в быстрорастущее состояние стало возможным в работах [16, 17] при создании специальных условий, увеличивших чувствительность измерения кинетики роста кристаллов. Подобные скачки пересыщения в данной геометрии слишком малы, чтобы быть наблюдаемыми использованной методикой.

Итак, рассмотренные факторы по отдельности или вместе увеличивают скорость роста граней и, как следствие, величины кинетического коэффициента K , усредненной по всей поверхности кристалла. В рамках использованной методики не представляется возможным выделить какой-либо отдельный механизм.

4.2. Аномальный рост

На рис. 6 приведены усредненные скорости роста кристаллов, измеренные в данных экспериментах, и две зависимости, полученные при 0.48 и 0.64 К [9]. Видно, что скорости аномального роста при температурах 92–180 мК согласуются друг с другом в пределах разброса и близки к скоростям, измеренным при 0.48 К. Скорости аномального роста при 0.64 К лежат существенно ниже. Тенденция увеличения скорости роста с понижением температуры в диапазоне 0.42–0.65 К прослеживалась ранее (см. рис. 13 в работе [6]) и естественно объяснялась уменьшением концентрации нормальной компоненты жидкости и ее вязкостью. Вклад фоонной компоненты мал и убывает с температурой по степенной зависимости $\sim T^4$.

Из рис. 6 следует, что скорость аномального роста выходит на плато при температуре ~ 0.4 К и

остаётся постоянной по крайней мере до 0.1 К. Отсутствие диссипации в окружающей среде означает, что её источник следует искать в процессах, происходящих на поверхности. Можно предположить, что кинетика роста определяется тем же механизмом, который и порождает переход в аномальное состояние.

4.3. Переплавление кристалла на игле и падение на дно

По завершении этапа аномального роста, сопровождающегося осцилляциями, давление в контейнере приходит к давлению фазового равновесия. На кристалл существенное влияние начинает оказывать градиент гидростатического давления, приводящий к неравномерному росту или плавлению участков его поверхности. Для изотропного кинетического коэффициента роста K этот случай рассмотрен в работе [18]. Показано, что центр контура кристалла начинает смещаться вниз со скоростью, пропорциональной коэффициенту K и радиусу кристалла R . Отрыв кристалла от опоры происходит после смещения центра на величину R . Таким образом, в этой модели время пребывания кристалла на острие не зависит от размеров кристалла и обратно пропорционально кинетическому коэффициенту роста.

К сожалению, подобный подход неприменим к результатам измерений, показанным на рис. 7. Съёмка перепадения кристаллов показала, что форма кристалла, а именно кривизна верхних и нижних участков контура, сильно различается. Это существенно нарушает условие, использованное в выводе в работе [18]. Тем не менее наблюдаемая тенденция показывает, что процесс перепадения кристаллов в градиенте гидростатического давления идёт быстрее для кристаллов, рождённых при более высоких пересыщениях.

Из эксперимента известно, что по окончании осциллирующего роста грани кристалла некоторое время остаются в состоянии с быстрой кинетикой. Наблюдаемая тенденция может быть объяснена тем, что грани кристаллов, рождённых при высоких пересыщениях, остаются дольше в аномальном состоянии, чем грани кристаллов, рождённых при низких пересыщениях.

Рисунок 5 демонстрирует изменение давления в контейнере во время падения кристалла с иглы на дно. Этот факт однозначно свидетельствует о том, что кинетика граней кристалла достаточно высока. Перемещение кристалла в контейнере вызовет из-

менение давления только в том случае, когда объём кристалла изменяется вследствие процессов роста/плавления. Немонотонный ход давления показывает, что на изменение объёма кристалла влияет не только градиент гидростатического давления, но и воздействие набегающего потока жидкости.

Модель падения кристалла с изотропным коэффициентом роста рассмотрена в работе [19]. Для зависимости $p(t)$ на рис. 5 при $T = 0.116$ К получено значение коэффициента $K \approx 0.22$ с/м. Это значение близко к величинам, измеренным при нормальном росте кристаллов, см. рис. 4. Таким образом, через 45 мс кинетика граней кристалла возвращается к нормальной.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Измерена усреднённая скорость нормального (медленного) роста кристаллов в диапазоне 130–186 мК. Определено граничное пересыщение $p_b \sim 0.8$ мбар, разделяющее области нормального и аномального роста. Наблюдение осцилляций давления при росте кристаллов в диапазоне температур 92–186 мК и пересыщениях до 7 мбар позволило определить значения кинетического коэффициента роста в области аномального (быстрого) роста. Показано влияние потока жидкости на рост кристалла. Получена оценка времени возвращения кинетики роста граней к нормальной.

Благодарности. Авторы благодарны С. Т. Болдареву, без чьей поддержки данная работа не могла бы быть выполнена. Разработанная им конструкция криостата растворения и контейнера обеспечила проведение экспериментов с квантовыми кристаллами до температуры 90 мК с визуальным контролем процесса роста кристаллов. Авторы благодарны В. С. Круглову за поддержку данной работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. А. Ф. Андреев, А. Я. Паршин, ЖЭТФ **75**, 1511 (1978).
2. К. О. Кешишев, А. Я. Паршин, А. В. Бабкин, Письма в ЖЭТФ **30**, 63 (1979).
3. S. Balibar, H. Alles, and A. Ya. Parshin, Rev. Mod. Phys. **77**, 317 (2005).
4. *Современная кристаллография*, под ред. В. К. Вайнштейна, Наука, Москва (1980).

5. J. P. Ruutu, P. J. Hakonen, A. V. Babkin, A. Ya. Parshin, J. S. Penttila, J. P. Saramaki, and G. Tvalashvili, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4187 (1996).
6. В. Л. Цымбаленко, *УФН* **185**, 1163 (2015).
7. V. L. Tsymbalenko, *Phys. Lett. A* **211**, 177 (1996).
8. V. L. Tsymbalenko, *Phys. Lett. A* **248**, 267 (1998).
9. В. Л. Цымбаленко, *ЖЭТФ* **119**, 1182 (2001).
10. V. L. Tsymbalenko, *Phys. Lett. A* **274**, 223 (2000).
11. J. P. Ruutu, P. J. Hakonen, A. V. Babkin, A. Ya. Parshin, and G. Tvalashvili, *J. Low Temp. Phys.* **112**, 117 (1998).
12. В. Л. Цымбаленко, *Письма в ЖЭТФ* **77**, 288 (2003).
13. P. E. Wolf, S. Balibar, F. Gallet, P. Nozieres, and E. Rolley, *J. Physique* **46**, 1987 (1985).
14. А. Я. Паршин, В. Л. Цымбаленко, *Письма в ЖЭТФ* **77**, 372 (2003).
15. А. Я. Паршин, В. Л. Цымбаленко, *ЖЭТФ* **130**, 319 (2006).
16. В. Л. Цымбаленко, *Письма в ЖЭТФ* **113**, 33 (2021).
17. V. L. Tsymbalenko, *J. Low Temp. Phys.* **208**, 324 (2022).
18. В. Л. Цымбаленко, *ФНТ* **21**, 162 (1995).
19. V. L. Tsymbalenko, *J. Low Temp. Phys.* **195**, 153 (2019).

ЗЕЕМАНОВСКОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ ЭКСИТОНОВ В КВАНТОВЫХ ЯМАХ GaAs/AlGaAs В ГЕОМЕТРИИ ФАРАДЕЯ

Ф. С. Григорьев^{a*}, М. А. Чукаев^a, В. А. Ловцюс^b, Ю. П. Ефимов^b, С. А. Елисеев^b

^a Лаборатория оптики спина,
Санкт-Петербургский государственный университет
198504, Санкт-Петербург, Россия

^b Ресурсный центр «Нанопотоника»,
Санкт-Петербургский государственный университет
198504, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 18 мая 2023 г.,
после переработки 2 июня 2023 г.
Принята к публикации 5 июня 2023 г.

Экспериментально исследовано зеемановское расщепление в гетероструктуре GaAs/AlGaAs. Проведенный численный расчет волновых функций экситонных состояний, учитывающий зоны тяжелых дырок, легких дырок и зону, отщепленную спин-орбитальным взаимодействием, количественно согласуется с экспериментальными данными как для экситона с тяжелой дыркой, так и для экситона с легкой дыркой. Показано, что для объяснения экспериментально полученных значений зеемановского расщепления в исследованной квантовой яме необходим учет как кулоновского взаимодействия, так и вклада трех зон в валентной зоне. Описан эффект экранирования экситонных состояний двумерным газом электронов, концентрация которых составляет величину $n \approx 10^9 \text{ см}^{-2}$. Численный расчет проведен для большого диапазона ширин квантовых ям и концентраций алюминия в барьерах, составлена карта зависимости величины эффективного g -фактора от этих параметров для магнитного поля величиной $B = 5 \text{ Тл}$.

DOI: 10.31857/S0044451023110068
EDN: PMGEIT

Величина этого эффекта невелика в меру отношения энергии размерного квантования электрона к расстоянию до соседних зон.

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследования магнитоэкситонов в квантовых ямах GaAs/AlGaAs [1–4] показывают нелинейность расщепления экситонных состояний в магнитном поле. Эта нелинейность объясняется ярко выраженным эффектом перенормировки g -фактора. Он заключается в изменении зеемановского расщепления свободного носителя заряда под влиянием, в первую очередь, соседних зон в полупроводнике. Так, например, простая зона проводимости в GaAs, позволяет описать эффект перенормировки g -фактора формулой Рот [5]. Входящие в эту формулу расстояния до соседних зон изменяются в квантовых ямах GaAs/AlGaAs за счет размерного квантования, что приводит к изменению величины эффекта перенормировки [6–8], который был измерен экспериментально по сигналу фарадеевского вращения.

Помимо электрона, в большей степени поведение экситона в магнитном поле определяется дыркой. Аналогичный формуле Рот подход для валентной зоны позволяет получить параметр κ , определяющий энергию взаимодействия углового момента дырки с магнитным полем с учетом влияния ближайших зон [9]. Однако этот параметр не включает взаимодействия зон тяжелых дырок, легких дырок и спин-отщепленной зоны между собой. Поэтому этот параметр определяет «голый» g -фактор дырок, который подвержен дальнейшей перенормировке за счет взаимодействия между тремя обозначенными зонами. Близко расположенные зоны тяжелых и легких дырок дают больший вклад в перенормировку «голового» значения g -фактора, однако, как мы показываем далее, учет влияния спин-отщепленной зоны необходим для полноценного описания g -фактора экситона.

* E-mail: f.grigoriev@spbu.ru

Наконец, зеемановское расщепление экситонного состояния отличается от простой суммы расщеплений для зон электронов и дырок. Для достаточно широких квантовых ям экситонная волновая функция формируется в виде стоячей волны и может быть приближенно описана волновым вектором центра масс экситона. В таких квантовых ямах была показана [10–14] зависимость перенормированного g -фактора экситона от волнового вектора для квантовых ям на основе GaAs, CdTe и ZnSe. В рамках этих работ величина g -фактора с большим или с меньшим успехом описывалась смешиванием тяжелых и легких дырок в валентной зоне. Тем не менее работы с более простой моделью [10–13], которая предполагает факторизуемую волновую функцию экситона с разделением движения центра масс от относительного движения электрона и дырки, не могут претендовать на описание изменения g -фактора с магнитным полем за счет вариации смешивания. Более сложные модели [14] используют численный микроскопический расчет экситонной волновой функции, который, в частности, отражает сжатие волновой функции экситона магнитным полем, и потому более полно могут описать поведение энергии экситона в магнитном поле, включая зеемановское расщепление под влиянием перенормировки g -фактора.

Пионерские работы по исследованию экситонов в типичных квантовых ямах (шириной 5–20 нм) [1–4] опираются на расчет уровней размерного квантования носителей, для которых затем рассчитывается энергетическая поправка за счет кулоновского взаимодействия. Тем не менее в таких системах вклад в перенормировку g -фактора экситонных эффектов также является существенным [15]. Учет экситонных эффектов как поправки часто оказывается недостаточно точным. Об этом свидетельствует значительное отличие получаемых экспериментально значений g -фактора экситона от численно полученных. Расхождение сохраняется и при попытке учета дополнительного смешивания, возникающего вследствие нарушения симметрии кристалла на границах квантовой ямы [16]. Симметричные соображения позволяют утверждать, что такое смешивание возможно, но, к сожалению, не указывают на его величину. В работах [15, 16] авторы характеризуют величину смешивания параметром $t_{lh} = 0.5$, однако приведенные вычисленные значения g -факторов умеренно согласуются с экспериментальными значениями. В настоящее время истинная величина этого параметра неизвестна, и необходимы дополнительные измерения и уточненные модели для достовер-

ного определения величины эффекта.

Литературные экспериментальные данные, с другой стороны, разрознены и ненадежны. Так, в ранних работах [1–4] полуширина на полувысоте исследуемых резонансов редко составляет величину менее 1 мэВ, что делает наблюдение расщепления экситонных состояний в полях менее 2 Тл довольно ненадежными. Кроме того, как показано в работе [17], даже небольшая концентрация двумерного газа электронов (ДГЭ) (примерно $5 \cdot 10^9 \text{ см}^{-2}$) способна экранировать кулоновский потенциал в экситоне. При экранировании волновая функция экситона также изменяется, что, в свою очередь, изменяет эффект перенормировки расщепления Зеемана. Этот эффект мы также иллюстрируем в нашей работе.

Наконец, зеемановское расщепление экситона с легкой дыркой может демонстрировать большую нелинейность при антипересечении этого состояния с возбужденными состояниями экситона с тяжелой дыркой [4, 16]. Величина этого эффекта также варьируется с шириной квантовой ямы и должна проявляться в квантовых ямах шириной менее 14 нм при концентрации алюминия в барьерах 30 %. Такое антипересечение дополнительно затрудняет экспериментальные исследования и делает практически невозможным описание расщепления экситонного резонанса экситона с легкой дыркой единственным параметром g -фактора.

Таким образом, необходимо подробное экспериментальное исследование поведения экситонных резонансов в типичных квантовых ямах GaAs/AlGaAs шириной от 5 до 30 нм, которое бы использовало доступные на сегодняшний момент высококачественные гетероструктуры. Такое исследование должно сопровождаться микроскопическими численными расчетами волновых функций экситона. Настоящая работа является первым шагом в этом направлении. Мы исследовали высококачественную гетероструктуру с квантовой ямой шириной 14 нм с невысокой концентрацией алюминия в барьерах (около 3 %). Малая концентрация алюминия позволила в расчете пренебречь эффектами разрывов эффективных масс [18] и диэлектрических проницаемостей [19] на границах квантовой ямы. Относительно малые барьеры также позволяют пренебречь дополнительным смешиванием зон в валентной зоне из-за нарушения симметрии на границах квантовой ямы [16]. При этом нам удалось достоверно описать величину g -фактора как экситона с тяжелой дыркой, так и экситона с легкой дыркой. Для этого в численном расчете мы учитываем смешивание зон

тяжелых дырок, легких дырок, а также спин-орбитально отщепленной зоны.

Статья построена следующим образом: в разд. 2 представлены детали численного метода, а также детали экспериментального метода, использованного в нашей работе; разд. 3 содержит описание результатов и сопоставление численно полученных энергий экситонов с экспериментальными величинами; в разд. 4 проведен подробный анализ полученных результатов; разд. 5 обобщает полученные результаты и подводит итог нашей работы.

2. МЕТОДЫ

Мы использовали специально разработанную численную методику получения волновых функций и энергий экситонных состояний для анализа экспериментально полученных значений энергий экситонных переходов. Экспериментально были измерены спектры отражения гетероструктуры GaAs/Al_{0.03}Ga_{0.97}As с квантовой ямой номинальной шириной 14 нм. Спектры представлены на рис. 1. Гетероструктура обладает высоким кристаллическим качеством. Это, в частности, проявляется в сравнимой величине радиационного и нерадикационного уширений линии экситонного резонанса в спектрах отражения. Как и в предыдущих работах, мы анализируем спектры отражения, подгоняя измеренные спектры с помощью формул

$$R = \left| \frac{r_b + e^{i\phi} r_{QW}}{1 + r_b e^{i\phi} r_{QW}} \right|^2, \quad (1)$$

$$r_{QW} = \sum_j \frac{i\hbar\Gamma_{0j}}{\omega - \omega_j + i\hbar(\Gamma_{0j} + \Gamma_j)}, \quad (2)$$

где r_b — фоновый амплитудный коэффициент отражения от поверхности образца, r_{QW} — вклад в коэффициент отражения экситонных резонансов, каждый из которых обладает энергией ω_j , радиационным уширением $\hbar\Gamma_{0j}$ и нерадикационным уширением $\hbar\Gamma_j$. Величина ϕ — это набег фазы между светом, отраженным от поверхности гетероструктуры, и светом, отраженным квантовой ямой. Поэтапное получение этих формул описано в монографии [20]. В рамках настоящей работы экспериментально наблюдались резонансы экситонов с тяжелой дыркой, с легкой дыркой, а также состояния трионов. Сумма вкладов этих резонансов описывается формулой (2). Применимость этих формул также подтверждает высокое качество исследуемого образца. Действительно, формулы игнорируют неоднородное уширение резонансов, и их способность аккуратно описать

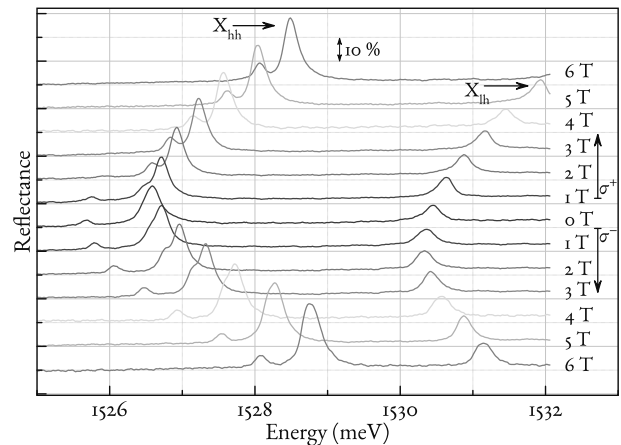


Рис. 1. Спектры отражения гетероструктуры с квантовой ямой GaAs/AlGaAs номинальной шириной 14 нм в магнитном поле до 6 Тл в двух циркулярных поляризациях. X_{hh} и X_{lh} отмечают положение экситонного резонанса с тяжелой и легкой дыркой соответственно

наблюдаемые спектры говорит о том, что такое уширение пренебрежимо мало по сравнению с однородным уширением резонансов.

Экспериментально полученные спектры для образца при температуре $T = 1.2$ К, измеренные в двух циркулярных поляризациях, показаны на рис. 1. Экситонные резонансы с тяжелой дыркой и с легкой дыркой обозначены как X_{hh} и X_{lh} соответственно. В магнитном поле эти резонансы испытывают диамагнитный сдвиг и зеемановское расщепление, которое более явно проявляется для резонанса экситона с легкой дыркой. Кроме того, наблюдаются еще два резонанса с энергиями ниже энергии экситона с тяжелой дыркой, которые мы приписываем трионным состояниям в синглетной и триплетной конфигурациях.

Интерпретация экспериментальных данных была проведена с помощью численного моделирования. Разработанный ранее численный метод [14, 21–24] позволяет найти решение уравнение Шредингера для экситона в квантовой яме и включает учет смешивания зон тяжелых и легких дырок. Он использует метод конечных разностей для получения большой разреженной матрицы, соответствующей гамильтониану экситона. Эта матрица частично диагонализуются с использованием алгоритма Арнольди. Способ построения матрицы на основе гамильтониана Латтинжера был детально описан в работе [24]. Для более полного согласия с экспериментом в настоящей работе гамильтониан был расширен и включает также зону, отщепленную спин-орбитальным взаимодействием. Структура такого га-

мильтониана для валентной зоны описана в монографии [25]. Общий гамильтониан экситона был записан в виде

$$H_{ex} = H_c + H_v - \frac{e^2}{\varepsilon r} + U(z_e, z_h), \quad (3)$$

где H_c описывает зону проводимости, H_v — валентную зону, а третий и четвертый члены описывают кулоновское взаимодействие и потенциал квантовой ямы (e — заряд электрона, ε — диэлектрическая проницаемость GaAs, r — расстояние между электроном и дыркой, $U(z_e, z_h)$ — прямоугольный потенциал квантовой ямы с координатами электрона z_e и дырки z_h вдоль оси роста гетероструктуры). Аналогично подходу в работе [24], первый, третий и четвертый члены в выражении (3) входят в матричную форму H_{ex} на диагонали. Сама матричная форма H_{ex} имеет размерность 6×6 , и ее структура следует из структуры H_v , описывающей поведение дырки в валентной зоне.

Переход к координатам относительного движения (ρ, ϕ) и центра масс (X, Y) в плоскости квантовой ямы отвечает цилиндрической симметрии диагональной части гамильтониана, позволяет отделить координаты центра масс в плоскости квантовой ямы и использовать анзац вида

$$\psi = \exp \left[i \frac{eB}{2c\hbar} (Yx - Xy) \right] \exp(ik_\phi \phi) \psi(z_e, z_h, \rho), \quad (4)$$

где $x = \rho \cos \phi$, $y = \rho \sin \phi$. При подстановке такого анзаца матрица гамильтониана становится бесконечной и состоит из блоков 6×6 исходного гамильтониана, представленного в базисе функций $\exp(ik_\phi \phi)$, где ϕ — угловая координата относительного движения экситона в плоскости квантовой ямы, а k_ϕ — целочисленные значения проекции орбитального момента экситона. Мы использовали ограниченный набор таких функций и составили матрицу гамильтониана в ограниченном базисе. Следуя обозначениям в [25], матрица H_v принимает вид

$$H_v = \begin{pmatrix} F & H & I & I & \frac{iH}{\sqrt{2}} & -i\sqrt{2}I & -i\sqrt{2}I \\ & G & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & G & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & G & 0 & 0 & 0 \\ & & & & S & 0 & 0 \\ & & & & & S & 0 \\ & & & & & & S \end{pmatrix}, \quad (5)$$

при этом ограниченный базис характеризуется набором чисел k_ϕ : $(0, 1, 2, -2, 1, 2, -2)$, которым

соответствуют проекции углового момента дырки $(3/2, 1/2, -1/2, -1/2, 1/2, -1/2, -1/2)$. В этой записи под диагональю подразумеваются комплексно сопряженные операторы. Оператор $S = (F+G)/2 + \Delta$, где $\Delta = 341$ мэВ — спин-орбитальное расщепление, описывает дырочные состояния в спин-орбитально отщепленной зоне. Сами операторы в терминах параметров Латтинжера выражаются как

$$H = \frac{\sqrt{3}\gamma_3\hbar^2}{m_0} (k_y k_z + i k_x k_z), \quad (6)$$

$$I = \frac{1}{\sqrt{12}} \left(\frac{3\gamma_2\hbar^2}{m_0} (k_x^2 - k_y^2) - 2i \frac{\hbar^2\sqrt{3}\gamma_3}{\sqrt{2}m_0} k_x k_y \right), \quad (7)$$

где k_x, k_y, k_z — компоненты обобщенного оператора импульса дырки, а m_0 — масса электрона. Для численных расчетов компоненты k_x, k_y, k_z были представлены в системе координат $(X, Y, \rho, \phi, z_e, z_h)$. Параметры Латтинжера в численном расчете имеют значения $\gamma_1 = 6.98$, $\gamma_2 = 2.06$, $\gamma_3 = 2.9$, $\kappa = -1.2$. В использованной численной методике обобщенный импульс был записан с вектор-потенциалом в симметричной калибровке с магнитным полем, направленным вдоль оси z . Вид операторов F и G в терминах параметров Латтинжера был приведен в работе [24]. Эти операторы представляют собой диагональные компоненты гамильтониана Латтинжера.

Строго говоря, коэффициенты в операторах F и G в составе оператора S отклоняются от параметров Латтинжера в меру отличия энергетических зазоров между спин-отщепленной зоной и верхними зонами проводимости от аналогичных зазоров для зон тяжелых и легких дырок. Более строгая модель должна отталкиваться от 14-зонной модели, описанной в работе [16], и использовать параметризацию этой модели, отвечающую экспериментально измеренным значениям эффективных масс в зонах тяжелых и легких дырок.

Логика построения ограниченного базиса продиктована правилами отбора по числу k_ϕ , и базис составлен из оптически активного состояния тяжелодырочного экситона и набора состояний легкодырочного экситона и экситона спин-орбитально отщепленной зоны со значениями $k_\phi = 1, \pm 2$, которые подмешиваются в первую очередь. В настоящей работе мы опускаем операторы, смешивающие легкодырочные состояния экситона с экситоном в спин-орбитально отщепленной зоне, а также не рассматриваем смешивание из-за нарушения симметрии на границе квантовой ямы, описанного в работе [16].

В рамках использованного подхода матрица H_v для легкодырочного экситона имеет вид

$$H_v = \begin{pmatrix} G & H^* & I & I & \frac{(G-F)i}{\sqrt{2}} & i\sqrt{\frac{3}{2}}H \\ & F & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & F & 0 & 0 & 0 \\ & & & F & 0 & 0 \\ & & & & S & 0 \\ & & & & & S \end{pmatrix} \quad (8)$$

с набором чисел k_ϕ для легкодырочного состояния $(0, -1, 2, -2, 0, 1)$ и проекциями углового момента дырки $(1/2, 3/2, -3/2, -3/2, 1/2, 1/2)$. Для всех состояний проекция спина электрона в зоне проводимости принимается за $\sigma_z = -1/2$ для выражения (5) и $\sigma_z = 1/2$ для выражения (8). Таким образом, оператор в левом верхнем углу описывает оптически активные состояния тяжелого экситона в (5) и легкого экситона в (8). Для легкодырочного экситона мы также игнорируем операторы смешивающие состояния тяжелодырочного экситона с состояниями экситона в спин-орбитально отщепленной зоне.

Результаты численного моделирования сопоставлены ниже с экспериментальными данными, приведенными на рис. 1.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

Прежде чем представить результаты нашего анализа, следует обратить внимание на особенность измеренных спектров отражения. На рис. 2 показаны спектры отражения в поле $B = 3$ Тл, измеренные в противоположных циркулярных поляризациях. Измерения были проведены в двух режимах, с генерацией ДГЭ и без генерации. Накачка ДГЭ производилась светом лампы накаливания, возбуждающей спектр отражения, с энергией выше 1549 мэВ. Для измерений без накачки ДГЭ использовался интерференционный фильтр, отсекающий излучение с энергией выше 1549 мэВ. Сравнение двух спектров показывает, что ДГЭ приводит к смещению экситонных состояний по энергии, причем для экситонного состояния с легкой дыркой это смещение (0.11 мэВ) превосходит смещение для тяжелодырочного экситона (0.04 мэВ). Наличие ДГЭ в квантовой яме приводит к образованию трионных состояний [26]: синглетное наблюдается в σ^- -поляризации, а триплетное проявляется в двух поляризациях, однако в σ^+ -поляризации состояние отдалается от экситонного с ростом магнитного поля, в то время как в σ^- -поляризации эти состояния сливаются друг с другом, как показано на рис. 1.

Экранирование экситонных состояний в квантовых ямах GaAs/AlGaAs обсуждалось в статье [17], где были получены зависимости изменения энер-

гии связи экситона и его силы осциллятора от безразмерного параметра $r_s = 1/a_B\sqrt{2\pi N_s}$, где a_B — боровский радиус экситона, а N_s — концентрация ДГЭ. Для анализа этого явления мы подогнали спектры отражения по методике, описанной в работе [24], и сопоставили энергии экситонных состояний с результатами численного расчета на рис. 3. По положению экситонных резонансов измеренные спектры отражения согласуются с расчетом для квантовой ямы шириной 12 нм. Такое отклонение от номинальной ширины объясняется неоднородностью образца и составляет для исследуемого образца 7 монослоев относительно точки измерения скорости роста гетероструктуры методом дифракции быстрых электронов. Как показано на рис. 3, результаты численного расчета отклоняются от экспериментально полученных энергий экситонных резонансов в области малых полей. Измерения в поле $B = 3$ Тл позволяют привязать результат численного расчета к энергиям экситонных состояний в условиях экранирования и оценить величину экранирования. В отсутствие магнитного поля величина экранирования составила $\Delta E_{scr} = 0.09$ мэВ для экситона с тяжелой дыркой и $\Delta E_{scr} = 0.27$ мэВ для экситона с легкой дыркой. По результатам работы [17] мы оценили концентрацию ДГЭ, соответствующую такому экранированию, и получили величину $N_s \approx 10^9 \text{ см}^{-2}$. Экранирование уменьшается с магнитным полем, однако для количественного исследования этого эффекта необходимо дополнительные экспериментальные и теоретические изыскания.

Следует заметить, что для гетероструктур на основе полупроводников II–VI был предложен и реализован [27] метод определения концентрации ДГЭ в квантовой яме по соотношению радиационных уширений триона и экситона. А в системе с монослоем WSe₂ [28] концентрацию удалось связать с энергетическим расстоянием между состоянием триона и экситона. Эти системы предоставляют большую энергию связи для экситона и триона, что упрощает экспериментальное измерение трионных состояний. Для реализации аналогичных подходов для гетероструктур на основе GaAs необходимы высококачественные образцы и низкие температуры. Так, например, в исследованной нами гетероструктуре трионный сигнал в отражении пропадает почти полностью уже при температуре $T = 4$ К.

Зеемановское расщепление трионных состояний, как видно на рис. 4, отличается от расщепления тяжелодырочного экситона для триплетного состояния, однако не отклоняется существенно для синглетного состояния. Вероятно, отличие волновой

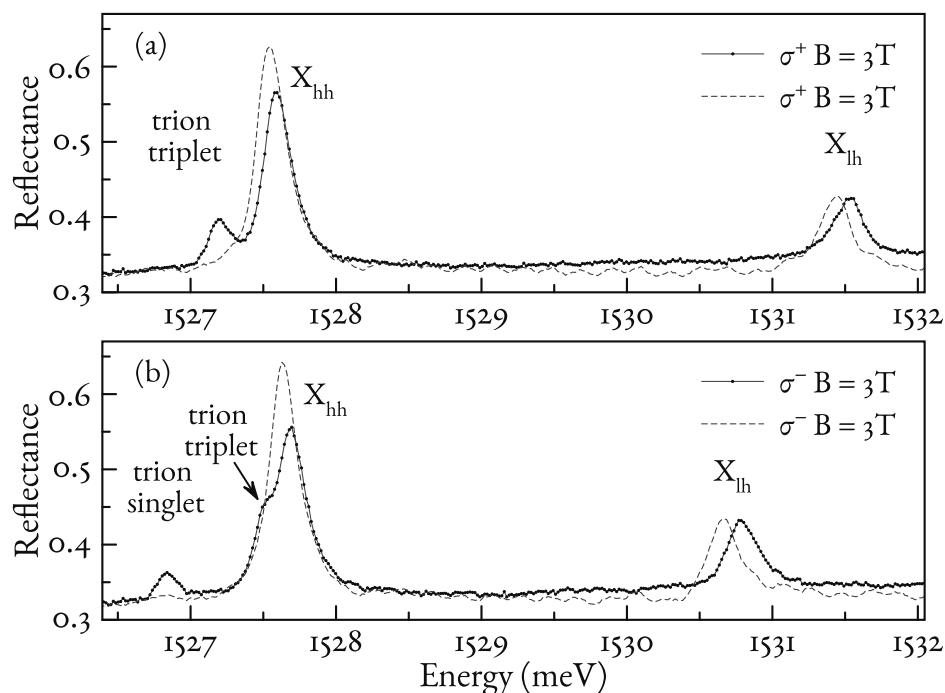


Рис. 2. Спектры отражения гетероструктуры с квантовой ямой GaAs/AlGaAs номинальной шириной 14 нм: *a* — σ^+ -поляризация; *b* — σ^- -поляризация. Штриховыми кривыми, в отличие от сплошных, приведены данные, измеренные без инжектирования двумерного газа электронов. В присутствии двумерного газа электронов проявляются трионные состояния, обозначенные «trion singlet» и «trion triplet»

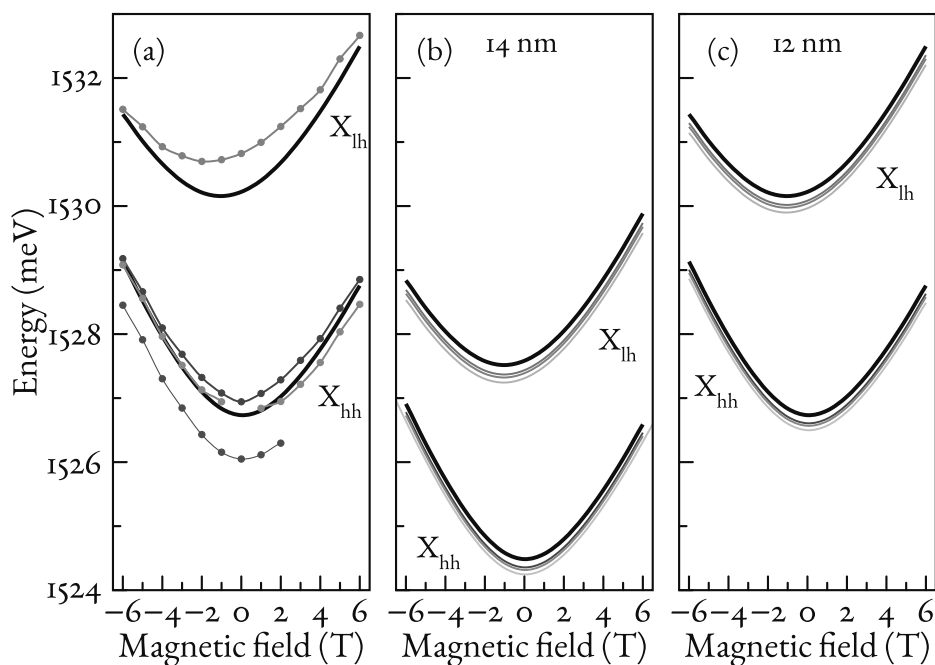


Рис. 3. (В цвете онлайн) Экспериментально полученные энергии состояний экситона с тяжелой дыркой (синие точки), экситона с легкой дыркой (красные точки), триплетного (зеленые точки) и синглетного (бордовые точки) состояний триона в квантовой яме GaAs/AlGaAs шириной 14 нм (*a*). Результаты численного расчета экситонных состояний для квантовых ям шириной 14 нм (*b*) и 12 нм (*c*). Цветные тонкие кривые на панелях *b*, *c* показывают результаты расчета, отвечающие характерным шагам сетки в 1.27 нм, 1.08 нм и 0.93 нм. Черные кривые — результаты экстраполяции численных результатов по шагу сетки. Черные кривые на панели *a* дублируют черные кривые на панели *c* для удобства сопоставления результатов расчета с экспериментом

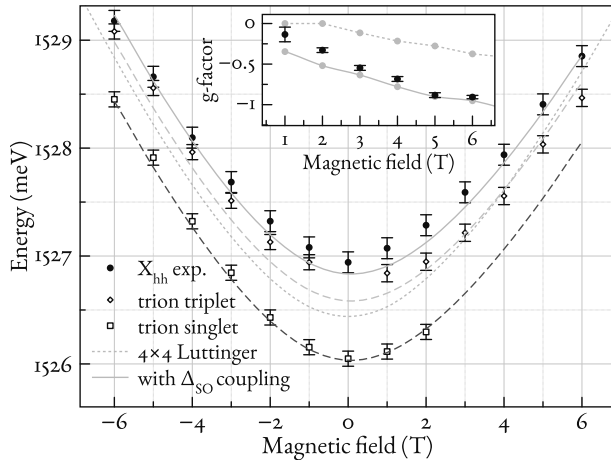


Рис. 4. Энергии состояний экситона с тяжелой дыркой, триплетного и синглетного состояний триона в квантовой яме GaAs/AlGaAs номинальной шириной 14 нм. Короткие штрихи — результат численного расчета с учетом лишь смешивания тяжелодырочного и легкодырочного экситонов; сплошная линия — расчет, учитывающий спин-орбитально отщепленную зону в валентной зоне; длинные штрихи — ожидаемое из расчета поведение трионных состояний. Вставка — величина зеемановского расщепления экситонного состояния в зависимости от магнитного поля, выраженная через g -фактор согласно формуле $\Delta E = g\mu_B B$

функции триона от волновой функции экситона приводит к изменению трионного g -фактора через эффект перенормировки g -фактора.

Теоретическое рассмотрение двумерного триона показывает, что отрицательно заряженный трион не должен быть связанным в триплетной конфигурации в квантовой яме GaAs [29]. Однако этот вывод не подтверждается экспериментально. Так, в работе [30] описано экспериментальное наблюдение отрицательного триплетного триона в поле $B = 2$ Тл. В наших измерениях триплетное состояние наблюдается уже в поле $B = 1$ Тл.

На рис. 4 результаты численного расчета сопоставлены с экспериментально полученными энергиями резонансов экситона и триона. Для удобства результаты численного расчета экситона сдвинуты на 100 мкэВ. Положения уровней трионных состояний на рис. 4 отмечены штриховыми кривыми, которые повторяют кривую для экситона, но сдвинуты на 0.15 мэВ (триплетное состояние) и на 0.7 мэВ (синглетное состояние).

Рисунок 4 сопоставляет две модели: гамильтониан Латтинжера, использованный в [24], и расширенную модель с учетом спин-орбитально отщепленной зоны. Вставка на рисунке показывает значение эффективного g -фактора как коэффициента пропорциональности между величиной магнитного по-

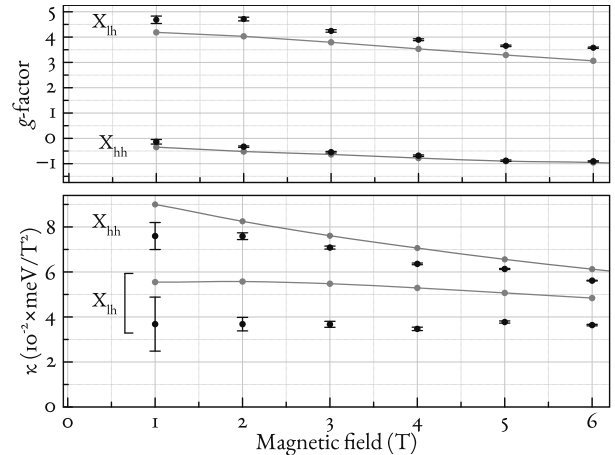


Рис. 5. Сравнение полученных численно величин эффективного g -фактора и постоянной диамагнитного сдвига κ с экспериментально полученными величинами в зависимости от величины магнитного поля

ля и зеемановским расщеплением состояния тяжелодырочного экситона. Сопоставление численных расчетов с экспериментально полученными величинами (черные точки) показывает лучшее согласие более полной модели, в которой учтено влияние отщепленной спин-орбитальным взаимодействием зоны.

Приведенные на рис. 4 погрешности указывают общее уширение экспериментально наблюдаемого состояния, но на вставке приведен доверительный интервал в 99 %, полученный из стандартного отклонения подгонки экспериментальных спектров, детально описанной в работе [24]. Положение экситонных резонансов возможно определить со стандартным отклонением $\sigma = 1\text{--}4$ мкэВ. Сопоставление наиболее полного расчета с экспериментально полученными величинами g -фактора показывает расхождение при малом значении поля и хорошее согласие в больших полях. Мы связываем это расхождение с эффектом экранирования, который влияет на геометрию волновой функции и, таким образом, изменяет величину эффекта перенормировки g -фактора.

В дополнение к эффективному g -фактору экситона с тяжелой дыркой мы приводим величину этого параметра для экситона с легкой дыркой на верхней панели рис. 5. Согласие с экспериментом в целом хуже, однако численный расчет точно воспроизводит зависимость эффективного g -фактора от магнитного поля. Эффективный g -фактор мы определяем согласно формуле

$$g(B) = \frac{\Delta E(B)}{\mu_B B}, \quad (9)$$

где ΔE — величина зеемановского расщепления экситонного состояния.

На нижней панели рис. 5 приведены значения эффективной константы диамагнитного сдвига, κ , в зависимости от магнитного поля B , определенной по формуле

$$\kappa = \frac{E_{\sigma^+}(B) + E_{\sigma^-}(B) - 2E(0)}{2B^2}, \quad (10)$$

где $E_{\sigma^+}(\sigma^-)$ — энергия экситонного состояния в поляризации $\sigma^+(\sigma^-)$, $E(0)$ — энергия экситона в отсутствие магнитного поля.

Мы считаем расхождение полученных численно значений константы диамагнитного сдвига результатом изменения экранирования экситона с ростом магнитного поля. Результат расчета хорошо согласуется с величинами диамагнитного сдвига, представленными в работе [1], в которой, наряду с хорошо согласующимися экспериментальными значениями параметра κ , показаны отклоняющиеся в сторону меньших значений данные, извлеченные из более ранних работ. Это может указывать на наличие эффекта экранирования экситона в этих работах.

4. ОБСУЖДЕНИЕ

Рисунок 5 демонстрирует отклонение диамагнитного сдвига от параболической зависимости с ростом магнитного поля. Это, наряду с влиянием возможного паразитного экранирования свободными носителями, осложняет анализ экспериментальных данных и сопоставление результатов различных исследований.

В заключение, на рис. 6 мы приводим результаты численного расчета эффективного g -фактора экситона с тяжелой дыркой для квантовых ям GaAs/AlGaAs в широком диапазоне концентраций алюминия в барьерах и для различных ширин квантовых ям. Данные приведены для значения магнитного поля $B = 5$ Тл.

На рис. 6 также приводятся значения, экспериментально полученные в рамках настоящей работы и доступные в литературе. Небольшое количество экспериментальных данных легко понять из самого рисунка. Действительно, значения g -фактора в зависимости от ширины квантовой ямы могут принимать значения в широком диапазоне, сравнимом с изменением эффективного g -фактора с магнитным полем. Последовательное исследование потребует большого количества измерений, которые необходимо подкрепить численным моделированием, похожим на примененное нами. Однако дополнительно потребуется учесть в расчетах изменение g -фактора электрона [6–8], скачок эффективных масс и

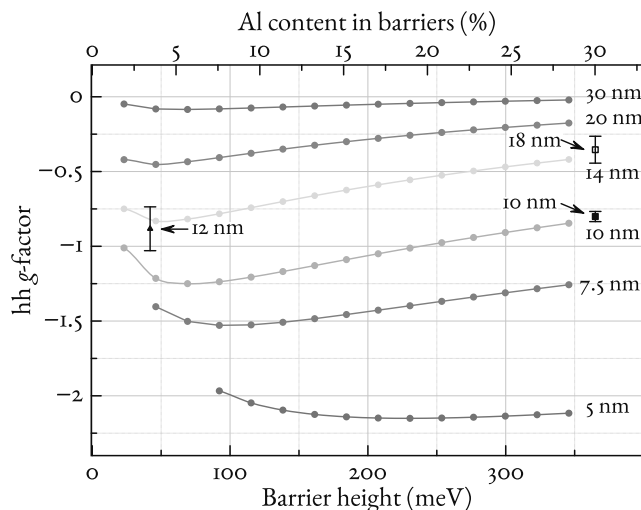


Рис. 6. (В цвете онлайн) Численно полученная величина g -фактора экситона с тяжелой дыркой для различных ширин квантовых ям и содержания алюминия в барьерах в поле $B = 5$ Тл. Черные точки показывают экспериментально полученные значения: треугольник — эта работа; светлый квадрат — [1]; темный квадрат — [2]

диэлектрических проницаемостей на границе квантовой ямы [18, 19], а также дополнительные эффекты смешивания в валентной зоне, вызванные нарушением симметрии на границе квантовой ямы [16].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенный численный расчет состояний экситонов показал хорошее согласие с экспериментально наблюдаемыми зависимостями энергий тяжело-дырочного и легкодырочного экситонов. Для достижения такого результата разработанный нами ранее численный расчет экситонных состояний [14, 21, 24] был расширен, чтобы учесть влияние спин-орбитально отщепленной зоны в валентной зоне. Сопоставление результатов расчетов в новой модели с экспериментально полученными энергиями экситонных резонансов демонстрирует наличие эффекта экранирования экситонного состояния в исследованной гетероструктуре. Этот эффект был изучен теоретически в работе [17]. Сравнение полученных нами результатов с результатами численного моделирования в этой работе позволило определить концентрацию ДГЭ, $N_s \approx 10^9 \text{ см}^{-2}$. Наблюдаемая величина экранирования для экситона с легкой дыркой значительно превосходит величину экранирования для экситона с тяжелой дыркой. Эффект экранирования уменьшается с магнитным полем, что значительно уменьшает наблюдаемую величину диамагнитного сдвига. Этот эффект особенно выражен для экситона с легкой дыркой. Приведенные на

рис. 6 численно полученные значения эффективно-го g -фактора экситона в поле $B = 5$ Тл для большого диапазона ширин квантовых ям и концентраций алюминия в барьерах подтверждаются полученными нами и опубликованными ранее экспериментальными данными.

Благодарности. Авторы благодарят ресурсный центр «Нанопотоника» СПбГУ за предоставленные образцы и А. Левантовского за программу «MagicPlot», использованную для анализа данных.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 21-72-00037, <https://rscf.ru/project/21-72-00037/>) и Санкт-Петербургского государственного университета (грант № 94030557).

ЛИТЕРАТУРА

1. G. E. W. Bauer and T. Ando, Phys. Rev. B **37**, 3130(R) (1988).
2. H. Wang, M. Jiang, R. Merlin, and D. G. Steel, Phys. Rev. Lett. **69**, 804 (1992).
3. N. J. Traynor, R. J. Warburton, M. J. Snelling, and R. T. Harley, Phys. Rev. B **55**, 15701 (1997).
4. В. Б. Тимофеев, М. Байер, А. Форхел, М. Потемски, Письма в ЖЭТФ **64**, 52 (1996).
5. L. M. Roth, B. Lax, and S. Zwerdling, Phys. Rev. **114**, 90 (1959).
6. W. Zawadzki, P. Pfeffer, R. Bratschitsch et al., Phys. Rev. B **78**, 245203 (2008).
7. I. A. Yugova, A. Greulich, D. R. Yakovlev et al., Phys. Rev. B **75**, 245302 (2007).
8. W. Shichi, T. Ito, M. Ichida et al., Jpn. J. Appl. Phys. **48**, 063002 (2009).
9. А. А. Киселев, Л. В. Моисеев, ФТТ **38**, 1574 (1996).
10. J. J. Davies, D. Wolverson, V. P. Kochereshko et al., Phys. Rev. Lett. **97**, 187403 (2006).
11. L. C. Smith, J. J. Davies, D. Wolverson et al., Phys. Rev. B **78**, 085204 (2008).
12. J. J. Davies, L. C. Smith, D. Wolverson et al., Phys. Rev. B **81**, 085208 (2010).
13. L. C. Smith, J. J. Davies, D. Wolverson et al., Phys. Rev. B **83**, 155206 (2011).
14. P. S. Grigoryev, O. A. Yugov, S. A. Eliseev et al., Phys. Rev. B **93**, 205425 (2016).
15. М. В. Дурнев, ФТТ **56**, 1364 (2014).
16. M. V. Durnev, M. M. Glazov, and E. L. Ivchenko, Phys. E **44**, 797 (2012).
17. Д. В. Кулаковский, С. И. Губарев, Ю. Е. Лозовик, Письма в ЖЭТФ **74**, 123 (2001).
18. R. C. Iotti and L. C. Andreani, Phys. Rev. B **56**, 3922 (1997).
19. A. D'Andrea, N. Tomassini, L. Ferrari et al., J. Appl. Phys. **83**, 7920 (1998).
20. E. L. Ivchenko, *Optical spectroscopy of semiconductor nanostructures*, Springer-Verlag, New York (2004).
21. E. S. Khramtsov, P. A. Belov, P. S. Grigoryev et al., J. Appl. Phys. **119**, 184301 (2016).
22. P. S. Grigoryev, V. G. Davydov, S. A. Eliseev et al., Phys. Rev. B **96**, 155404 (2017).
23. P. A. Belov, Phys. E **112**, 96 (2019).
24. М. А. Чукеев, А. С. Курдюбов, В. А. Ловтциус et al., arXiv:2304.04988 (2023).
25. Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус, *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках*, Наука, Москва (1972).
26. R. T. Phillips, G. C. Nixon, T. Fujita et al., Sol. St. Comm. **98**, 287 (1996).
27. G. V. Astakhov, V. P. Kochereshko, D. R. Yakovlev et al., Phys. Rev. B **65**, 115310 (2002).
28. K. Wagner, E. Wietek, J. D. Ziegler et al., Phys. Rev. Lett. **125**, 267401 (2020).
29. R. A. Sergeev and R. A. Suris, Phys. St. Sol. (b) **227**, 387 (2001).
30. I. Bar-Joseph, Semicond. Sci. Technol. **20**, R29 (2005).

СПИНОВЫЕ СОСТОЯНИЯ ИОНОВ Co И ПЕРЕХОД МЕТАЛЛ–ПОЛУПРОВОДНИК В СЛОИСТЫХ КОБАЛЬТИТАХ $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ ($\delta = 0.52, 0.74$)

Н. И. Солин*, С. В. Наумов, А. В. Королев, В. Р. Галахов

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики металлов имени М. Н. Михеева
Уральского отделения Российской академии наук
620108, Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 24 октября 2022 г.,
после переработки 21 июня 2023 г.
Принята к публикации 22 июня 2023 г.

Из исследований магнитных свойств определены спиновые состояния ионов Co в $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ с учетом парамагнитного вклада ионов Pr^{3+} для содержаний кислорода $\delta = 0.52$ и $\delta = 0.74$. Результаты, полученные без учета парамагнитного вклада ионов Pr^{3+} , не согласуются с известными экспериментальными данными. При понижении температуры переход типа металл–изолятор в $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.52}$ происходит резко при резком изменении спинового состояния ионов Co^{3+} из HS/LS- в LS/IS-состояние. При этом в октаэдрах ионы Co^{3+} переходят из высокоспинового состояния (HS, $S = 2$) в низкоспиновое (LS, $S = 0$), а в пирамидах — из LS-состояния в промежуточное спиновое состояние (IS, $S = 1$) в согласии с известными структурными данными. В $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.74}$ переход металл–полупроводник происходит плавно из HS/LS- в HS/IS-состояние при плавном изменении спинового состояния ионов Co^{3+} из (LS, $S = 0$) в (IS, $S = 1$) в пирамидах, без изменений спиновых состояний ионов Co^{3+} (HS, $S = 2$) и Co^{4+} (LS, $S = 1/2$) в октаэдрах.

DOI: 10.31857/S004445102311007X

EDN: PKISYU

1. ВВЕДЕНИЕ

Упорядоченные слоистые оксиды кобальта $\text{RBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$, где R — редкоземельный ион, а δ определяет содержание кислорода, демонстрируют множество интересных явлений, включая переход металл–изолятор (МИ) [1, 2], парамагнитный (PM), ферромагнитный (FM), антиферромагнитный (AFM) переходы [1–7] и метамгнитное поведение [8]. Упорядоченность состоит в том, что ионы R и Ba образуют не твердый раствор, а упорядочены в чередующихся плоскостях вдоль направления [001]. Движущей силой катионного упорядочения является различие ионных радиусов Ba^{2+} и R^{3+} : редкоземельные ионы R^{3+} имеют размеры меньшие, чем ионы Ba^{2+} . Оксиды имеют слоистую кристаллическую структуру перовскита, в которой слои RO_δ и BaO перемежаются слоями CoO .

В зависимости от содержания кислорода $0 \leq \delta \leq 1$ валентное состояние иона кобальта в $\text{RBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ меняется от Co^{2+} до Co^{4+} . В $\text{RBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ при $\delta = 0.5$ присутствуют только ионы Co^{3+} , которые расположены в кристаллической решетке, состоящей из равного числа октаэдров CoO_6 и квадратных пирамид CoO_5 [1]. Необычные свойства $\text{RBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$, как и LaCoO_3 , в основном обусловлены тем, что ионы кобальта могут находиться в трех разных спиновых состояниях: в низкоспиновом (LS, $S = 0$), промежуточно-спиновом (IS, $S = 1$) и высокоспиновом (HS, $S = 2$). Физическая природа происходящих в этих материалах процессов при переходе металл–изолятор до сих пор не выяснена. Основным вопросом в этих материалах является определение движущих сил перехода металл–изолятор.

В стандартной зонной схеме электропроводности в диэлектриках и полупроводниках заполненные зоны отделены от пустых запрещенной зоной — энергетической щелью. Переход металл–изолятор в большинстве случаев связан с исчезновением энергетической щели [9]. В отличие от манганитов, пе-

* E-mail: solin@imp.uran.ru

реход металл–изолятор в кобальтитах не связан с магнитным упорядочением. В слоистых кобальтитах разности энергий между разными спиновыми состояниями ионов Co малы. Вследствие этого при изменении параметров среды (температуры, давления, магнитного поля и др.) в кобальтитах могут легко происходить переходы ионов Co из одного спинового состояния в другое [10]. Эти переходы сопровождаются структурным фазовым переходом, исчезновением энергетической щели, изменением транспортных свойств и переходом к квази-металлическому состоянию. Однако одного исчезновения энергетической щели для определения перехода металл–изолятор недостаточно. Фазовый переход металл–изолятор предполагает значительное изменение величины и вида электросопротивления: с ростом температуры электросопротивление в диэлектриках и полупроводниках сильно уменьшается, в металлах — растет [9].

В настоящее время наиболее подробно изучены соединения $\text{RBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ при $\delta \simeq 0.5$ с малыми размерами ионов из середины ряда редкоземельных элементов $\text{R}=\text{Eu}, \text{Gd}, \text{Tb}$ и др. [1–7]. Наименее изучены соединения $\text{RBaCo}_2\text{O}_{5.5}$ с большими размерами ионов, где $\text{R}=\text{Nd}, \text{Pr}$ и немагнитный ион La^{3+} . Они показывают свойства, отличные от других кобальтитов. В соединениях $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.50}$ [11], $\text{LaBaCo}_2\text{O}_{5.50}$ [12] и $\text{NdBaCo}_2\text{O}_{5.48}$ [8] ниже температуры Нееля $T_N \approx 230\text{--}250\text{ K}$ в магнитном поле сохраняется FM-состояние, в то время как другие кобальтиты остаются в AFM-состоянии [1–7, 13]. Предполагается, что эти особенности связаны с большим размером ионов R^{3+} [11, 14].

Слоистый кобальтит $\text{NdBaCo}_2\text{O}_{5.48}$ ниже $T \simeq 20\text{ K}$ в небольшом магнитном поле переходит из AFM-состояния в метамагнитное — в смешанное FM/AFM-состояние [8]. Результаты объяснены влиянием размера иона Nd^{3+} и магнитного поля на AFM-состояние $\text{NdBaCo}_2\text{O}_{5.48}$. Исходя из метамагнитной модели Ландау [15] предполагалось, что FM-связь внутри слоев Co сильная, а AFM-связь между слоями Co, разделенными слоями NdO_δ , ослаблена из-за большого размера ионов Nd^{3+} . Выше $T \simeq 20\text{ K}$ соединение $\text{NdBaCo}_2\text{O}_{5.48}$ представляет смесь обменно-связанных FM- и AFM-фаз, что подтверждается обнаружением обменного смещения [8]. Неоднородное магнитное состояние $\text{NdBaCo}_2\text{O}_{5.48}$ согласуется с нейтронными данными для близкого по составу соединения $\text{NdBaCo}_2\text{O}_{5.47}$ [16].

Магнитные и транспортные свойства рассматриваемых соединений в большой степени определяют-

ся и содержанием кислорода [3, 17]. О свойствах соединений $\text{RBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ с более высоким содержанием кислорода $\delta > 0.5$ в настоящее время известно мало (см. ссылки в работе [18]). В монокристаллах $\text{GdBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ свойства электронных ($\delta < 0.5$) и дырочных ($\delta > 0.5$) соединений асимметричны. С увеличением концентрации носителей тока в электронных соединениях электросопротивление увеличивается, намагнитченность уменьшается, а в дырочных — электросопротивление уменьшается, намагнитченность увеличивается [3].

В поликристаллах $\text{NdBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ при $0.37 \leq \delta \leq 0.65$ FM-состояние сохраняется ниже T_N при всех значениях δ и объяснено влиянием размера иона Nd^{3+} на AFM-состояние [18]. При увеличении δ температуры транспортных и магнитных переходов (T_{MI} , T_N и T_C) уменьшаются примерно на 100–150 K. Сильная зависимость температур Кюри T_C , Нееля T_N и перехода металл–изолятор T_{MI} от содержания кислорода объяснена возникновением ионов Co^{4+} и влиянием их на обменные взаимодействия. Для всех значений δ переход металл–изолятор в кобальтитах $\text{NdBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ происходит при изменении спинового состояния ионов Co^{3+} из HS/LS-состояния в металлической фазе в IS/LS-состояние в полупроводниковой фазе, при этом с увеличением δ спиновое состояние ионов Co^{3+} увеличивается от IS/LS- к HS/LS-состоянию. При значениях $\delta \simeq 0.65$ происходит переход типа «сильнолегированный полупроводник – плохой металл» без резкого изменения спинового состояния ионов Co^{3+} [18].

Цель данной работы — выяснение влияния содержания кислорода δ на электрические, магнитные свойства и спиновое состояние ионов Co в $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ вблизи переходов металл–изолятор. Известные данные спиновых состояний ионов Co^{3+} оксида $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.5}$ не согласуются его структурными данными [19–22], а для $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.75}$ изменение спиновых состояний ионов Co при переходе в металлическое состояние не обнаружено [17]. Влияние ионов Co^{4+} на спиновое состояние ионов Co^{3+} также не выявлено.

Данная работа является продолжением цикла наших работ [8, 18, 23, 24] по исследованию влияния вида редкоземельного иона на спиновое состояние ионов Co при переходе металл–изолятор в кобальтитах $\text{RBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$, $\delta \simeq 0.50$. В настоящее время многие исследователи полагают, что в кобальтитах $\text{RBaCo}_2\text{O}_{5.50}$ ионы Co^{3+} переходят из HS/IS-состояния в металлической фазе в LS/IS-состояние в полупроводниковой фазе. Однако структурные ис-

следования соединений $\text{RBaCo}_2\text{O}_{5.5}$ на основе Gd [4], Tb [5], Pr [20] не согласуются с этим предположением. Парамагнитные свойства слоистых кобальтитов, из исследований которых определяются спиновые состояния ионов Co, обусловлены РМ-вкладами ионов Co и R^{3+} . Но большинство исследователей не учитывают или неправильно определяют РМ-вклад редкоземельного иона R^{3+} (см. ссылки в [24]). Некоторые авторы предполагают, что ионы Pr^{3+} в соединениях $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ немагнитны [17]. Наши исследования $\text{RBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$, где $\delta \simeq 0.50$, R=Gd, Tb, Nd [8, 18, 23, 24], показывают, что при учете РМ-вклада ионов R^{3+} переход металл–изолятор происходит при изменении спинового состояния ионов Co^{3+} из HS/LS- в LS/IS-состояние в согласии с известными структурными данными [4, 5, 20]. Ниже показано, что ионы Pr^{3+} в соединениях $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ обладают магнитным моментом и РМ-видом температурного поведения намагниченности.

В данной работе впервые показано, что переход из металлического в полупроводниковое состояние в слоистых кобальтитах $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ при $\delta \simeq 0.75$ происходит при изменении спинового состояния ионов Co, и предложена модель спинового перехода металл–полупроводник с учетом ионов Co^{3+} и Co^{4+} . Переход металл–полупроводник в $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.74}$ происходит при изменении спинового состояния ионов Co^{3+} в пирамидах из HS/LS- в HS/IS-состояние, без изменения спинового состояния ионов Co^{3+} и Co^{4+} в октаэдрах. Предполагается, что ионы Co^{4+} в слоистых кобальтитах всегда находятся в LS($S = 1/2$)-состоянии из-за сильного кристаллического поля [25]. Предложенная модель спинового перехода хорошо согласуется с экспериментом и объясняет отрицательный коэффициент объемного расширения $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.74}$ [26].

2. ОБРАЗЦЫ И МЕТОДИКИ ИССЛЕДОВАНИЙ

Поликристаллические образцы $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ синтезированы твердофазным методом из исходных компонентов Pr_6O_{11} , BaCO_3 и Co_3O_4 ступенчатым отжигом на воздухе при $T = 900\text{--}1000^\circ\text{C}$. Спрессованные в таблетки образцы спекали при температуре 1165°C в течение 24 ч. Плотность образца составляла около 90 % от рентгеновской плотности. Абсолютное содержание кислорода $\delta \simeq 0.74$ определено методом восстановления образца в водороде. Содержание кислорода $\delta \simeq 0.52$ достигнуто дополнительным отжигом исходного

образца на воздухе при определенной температуре с последующей закалкой и определялось по изменению веса [3]. По данным порошковой дифракции рентгеновских лучей все образцы были однофазными. При комнатной температуре поликристаллы $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.74}$ имеют тетрагональную структуру $P4/mmm$ (№ 123) с элементарной ячейкой $a_p \times a_p \times 2a_p$, где a_p — параметр псевдокубической ячейки перовскита. Образец с $\delta \simeq 0.52$ имеет орторомбическую структуру и описывается пространственной группой $Pmmm$ (№ 47) с элементарной ячейкой $a_p \times 2a_p \times 2a_p$. Значения структурных параметров образцов согласуются с литературными данными [11]. Измерения электросопротивления проведены четырехконтактным методом.

3. ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОБАЛЬТИТОВ $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$, $\delta = 0.52, 0.74$

С увеличением δ величина электросопротивления и вид его температурной зависимости $\rho(1/T)$ соединений $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ заметно различаются (рис. 1). С увеличением δ электросопротивление сильно уменьшается. В температурном интервале 100–400 К величина электросопротивления $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.74}$ примерно на 2 порядка меньше, чем в $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.52}$. В кобальтите $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.52}$ при $T_{MI} \simeq 350 \pm 2$ К происходит переход типа изолятор–«плохой» металл. Выше T_{MI} образец переходит в слабо зависящее от температуры состояние электросопротивления с $\rho \simeq 5 \cdot 10^{-3}$ Ом·см, что соответствует переходу к плохому металлу. Здесь знак производной электросопротивления $d\rho/dT$ остается отрицательным, свидетельствуя о полупроводниковом характере $\rho(T)$, связанном с вкладом межгранульных сопротивлений поликристалла.

При увеличении δ соединение $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.74}$ не испытывает перехода типа металл–изолятор, а происходит плавный переход из металлического в полупроводниковое состояние при $T_{MSC} \simeq 270 \pm 10$ К (вставка к рис. 1b). Температурная зависимость электросопротивления $\rho(T)$ при $T > T_{MSC}$ имеет металлическое поведение, величина электросопротивления увеличивается примерно на 15 % при нагреве до 400 К от минимального значения электросопротивления $\rho_{min} \simeq 5 \cdot 10^{-4}$ Ом·см при $T_{MSC} \simeq 270 \pm 10$ К. Приведенные данные электросопротивления $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.74}$ согласуются с металлическим поведением электросопротивления, обна-

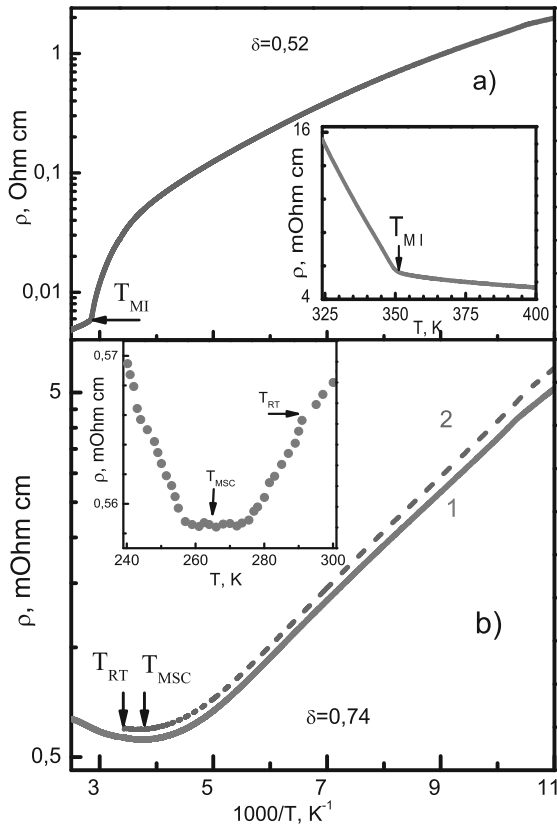


Рис. 1. Температурные зависимости электропроводности поликристаллов $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.52}$ (a) и $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.74}$ (b). Описание кривых 1 и 2 в тексте. На вставках приведены температурные зависимости электропроводности образцов вблизи переходов металл–полупроводник

руженным в поликристалле $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.70}$ [1]. С увеличением содержания кислорода температуры переходов уменьшаются примерно на 80 K (см. вставки к рис. 1).

Отметим различный — резкий и плавный — характер поведения $\rho(T)$ этих двух образцов при переходе в непроводящее состояние. Такая особенность $\rho(T)$ согласуется с резким изменением спинового состояния ионов Co^{3+} в $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.52}$ и с плавным в $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.74}$ вблизи температур перехода (см. ниже). Эти результаты качественно подтверждают влияние спинового состояния на электропроводность. Температурная зависимость электропроводности $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.74}$ в небольшом интервале температур (около 100 K) ниже T_{MSC} описывается активационным выражением (кривая 1 на рис. 1b)

$$\rho = \rho_0 \exp(\Delta E/kT) \quad (1)$$

с энергией активации электропроводности $\Delta E \simeq 30$ мэВ и предэкспоненциальным коэф-

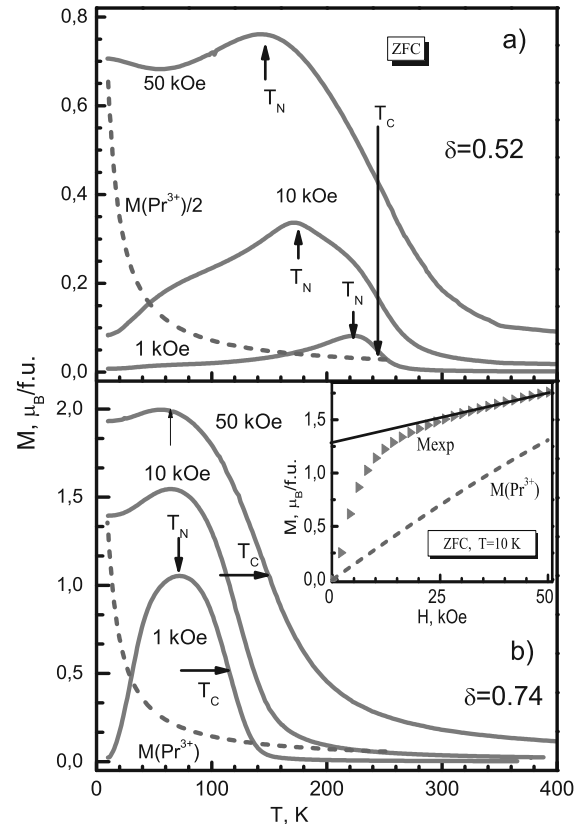


Рис. 2. Температурные зависимости намагниченности $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.52}$ (a) и $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.74}$ (b) в магнитном поле $H = 1, 10, 50$ кЭ. Вставка к рис. 2b — полевые зависимости намагниченности (символы) при 10 K. Штриховые линии — РМ-вклад ионов Pr^{3+} , определенный из выражения (2) при $H = 50$ кЭ

фициентом $\rho_0 \sim 10^{-4}$ Ом·см, присущими сильно легированным полупроводникам. Близкие значения ΔE и ρ_0 были найдены в $\text{NdBaCo}_2\text{O}_{5.65}$ [18].

Обнаружено нестационарное поведение электропроводности оксида $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.74}$: электропроводность не возвращается в исходное состояние и увеличивается после температурных изменений (штриховая кривая 2 на рис. 1b). Можно предположить, что переход металл–полупроводник $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.74}$ при $T_{MSC} = 270 \pm 10$ K сопровождается структурным переходом, которым можно объяснить нестационарное поведение электропроводности оксида $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.74}$. В пользу этого предположения свидетельствуют изменения спиновых состояний ионов Co^{3+} при $T < T_{ST} \simeq 280$ K (см. ниже). Для проверки этого предположения мы провели измерения $\rho(T)$ при двух способах изменения температуры образца. Сначала образец был измерен при температуре от 77 до 400 K и

охлажден до комнатной температуры. При нагреве выше T_{MSC} (нагрев от комнатной температуры $T_{RT} = 293$ К до 400 К и охлаждение до T_{RT}) электросопротивление возвращается в исходное значение (кривая 1 на рис. 1b). При охлаждении образца ниже T_{MSC} (от T_{RT} до 77 К и обратно до T_{RT}) электросопротивление не возвращается к исходному значению и увеличивается на 10–15 % (кривая 2 на рис. 1b).

Нестационарное поведение электросопротивления может быть связано с влиянием размера иона Pr^{3+} . Кобальтиты $\text{R}\text{BaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ с большими размерами ионов ($\text{R} = \text{Nd}, \text{Pr}, \text{La}$) демонстрируют метастабильные состояния [27]. Кислородные вакансии в соединениях $\text{R}\text{BaCo}_2\text{O}_{5.50}$ с малыми размерами ионов R упорядочены, места кислорода упорядочены в плоскости RO_δ вдоль оси a , и ионы Co^{3+} расположены в кристаллической решетке из равного числа октаэдров CoO_6 и квадратных пирамид CoO_5 [1]. Согласно нейтронным исследованиям, соединения $\text{Pr}\text{BaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ при $\delta \simeq 0.75$ склонны к разупорядочению. В соединениях $\text{Pr}\text{BaCo}_2\text{O}_{5.75(1)}$ упорядочение кислородных вакансий, как в соединениях $\text{R}\text{BaCo}_2\text{O}_{5.50}$, не наблюдается [17]. Неупорядоченность кислородных вакансий также может быть причиной нестационарного поведения электросопротивления.

4. МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА КОБАЛЬТИТОВ $\text{Pr}\text{BaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$, $\delta = 0.52, 0.74$

На рис. 2 приведены температурные зависимости намагниченности $\text{Pr}\text{BaCo}_2\text{O}_{5.52}$ и $\text{Pr}\text{BaCo}_2\text{O}_{5.74}$ при $T = 10$ –400 К в магнитном поле $H = 1, 10, 50$ кЭ при охлаждении без магнитного поля (ZFC). Стрелками указаны температуры Кюри T_C , определенные из производной намагниченности dM/dT , температуры AFM-упорядочения (T_N) соединений, оцененные из температуры максимума намагниченности $M(T)$. Как и в других слоистых кобальтитах [1–7], при $H = 1$ кЭ намагниченность обоих соединений резко возрастает при температуре Кюри T_C , достигает максимума при температуре Нееля T_N , ниже которой уменьшается, что свидетельствует о переходе образца в AFM-состояние (рис. 2a). В отличие от $\text{R}\text{BaCo}_2\text{O}_{5.50}$ с малыми размерами ионов R [1–7], FM-намагниченность $\text{Pr}\text{BaCo}_2\text{O}_{5.74}$ и $\text{Pr}\text{BaCo}_2\text{O}_{5.52}$ ниже T_N не исчезает, увеличивается при увеличении магнитного поля, сохраняется до самых низких температур.

Температура Кюри $\text{Pr}\text{BaCo}_2\text{O}_{5.52}$ не зависит от напряженности магнитного поля до 50 кЭ,

$T_C = 243 \pm 2$ К. Температура T_N перехода в AFM-состояние сильно зависит от напряженности магнитного поля. С увеличением магнитного поля до 50 кЭ величина T_N уменьшается примерно на 80 К: от 223 до 145 К. Эти результаты показывают, что магнитное поле в основном влияет на AFM-состояние, подавляет его и усиливает FM-состояние. Фактически это означает, что $\text{Pr}\text{BaCo}_2\text{O}_{5.52}$ является метамагнетиком при высоких температурах, как $\text{Gd}\text{BaCo}_2\text{O}_{5.50}$ и $\text{Tb}\text{BaCo}_2\text{O}_{5.50}$ [3, 7, 8].

В отличие от $\text{Pr}\text{BaCo}_2\text{O}_{5.52}$, в $\text{Pr}\text{BaCo}_2\text{O}_{5.74}$ при увеличении магнитного поля до 50 кЭ величина $T_N = 67 \pm 2$ К практически не меняется, а T_C увеличивается от 113 до 144 К. Результаты свидетельствуют о преобладании в этом соединении FM-взаимодействий. На это же указывает уменьшение T_N и T_C примерно на 100 К и большая намагниченность ($M \simeq 1.8\mu_B$) при увеличении содержания кислорода δ от 0.52 до 0.74. Аналогичные изменения T_N и T_C в зависимости от содержания кислорода обнаружены в $\text{Nd}\text{BaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ [18]. Эти результаты для $\text{Pr}\text{BaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$, как и для $\text{Nd}\text{BaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ [18], объяснены увеличением содержания ионов Co^{4+} , уменьшением косвенного обмена Co^{3+} –O– Co^{3+} и усилением FM-взаимодействий по эмпирическому правилу Гуденафа–Канамори из-за FM-сверхобменных взаимодействий Co^{3+} –O– Co^{4+} [28].

Сравнение магнитных и электрических свойств $\text{Pr}\text{BaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ и $\text{Nd}\text{BaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ [8, 18] показывает, что свойства их близки. Ферромагнитное поведение ниже T_N в $\text{Nd}\text{BaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ [18] объяснено большим размером ионов Nd^{3+} в метамагнитной модели слоистых AFM [15]. Радиус иона Pr^{3+} даже больше, чем иона Nd^{3+} . Можно полагать, что FM-состояние в кобальтитах $\text{Pr}\text{BaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ также вызвано большим размером иона Pr^{3+} . Резкое увеличение намагниченности в магнитном поле $H \geq 1$ кЭ обнаружено в AFM-соединении $\text{Pr}\text{BaCo}_2\text{O}_{5.75}$ (см. вставку на рис. 2b в работе [17]). Результаты [17], как и в работе [8] для $\text{Nd}\text{BaCo}_2\text{O}_{5.48}$, можно объяснить переходом оксида $\text{Pr}\text{BaCo}_2\text{O}_{5.75}$ из AFM-состояния в метамагнитное состояние.

5. СПИНОВЫЕ СОСТОЯНИЯ ИОНОВ Co В КОБАЛЬТИТАХ $\text{Pr}\text{BaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$, $\delta = 0.52, 0.74$

Ниже приведены результаты исследований спиновых состояний ионов Co соединений $\text{Pr}\text{BaCo}_2\text{O}_{5.52}$ и $\text{Pr}\text{BaCo}_2\text{O}_{5.74}$ вблизи переходов металл–полупроводник, определенные с учетом и без учета РМ-вклада ионов Pr. Магнитные свойства

соединений $\text{RBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ определяются вкладами двух магнитных ионов: редкоземельного иона R и ионов Co. Из исследований полевых зависимостей намагниченности $\text{GdBaCo}_2\text{O}_{5.45}$ и $\text{GdBaCo}_2\text{O}_5$ при 2 К установлено, что намагниченность насыщения обоих соединений очень близка к моменту свободного иона Gd^{3+} . Был сделан вывод, что в этих соединениях ион Gd^{3+} действует как невзаимодействующий редкоземельный парамагнитный ион [29]. Это предположение было распространено и на другие ионы. Для выделения вклада иона Co из намагниченности слоистого кобальтита вычитали РМ-вклад редкоземельного иона R, предполагая его невзаимодействующим [3, 6, 7]. Намагниченность невзаимодействующих парамагнитных ионов описывается функцией Бриллюэна $B_S(x)$ [30]:

$$M = N_A g \mu_B J B_S(x), \quad (2)$$

где N_A — число Авогадро, $x = g \mu_B J H / kT$, μ_B — магнетон Бора, g — фактор Ланде ионов R^{3+} , J — суммарный магнитный момент ионов R^{3+} , H — напряженность магнитного поля, k — постоянная Больцмана.

Штриховыми линиями на рис. 2 показаны температурные зависимости РМ-вклада невзаимодействующего иона Pr^{3+} в магнитном поле 50 кЭ, рассчитанные из выражения (2). Видно (рис. 2), что РМ-вклад иона Pr^{3+} почти 2 раза превышает величину намагниченности для $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.52}$ и определяет значительную часть намагниченности для $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.74}$ при $T \simeq 10$ –20 К. На вставке к рис. 2b показаны (символы) полевые зависимости намагниченности соединения $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.74}$ и вклад ионов Pr^{3+} (штриховая линия), рассчитанный из выражения (2) при 10 К.

Намагниченность насыщения $M_S \simeq (1.3\text{--}1.4)\mu_B$, полученная экстраполяцией намагниченности при $H \rightarrow 0$, показывает, что РМ-вклад ионов Pr^{3+} значительно меньше рассчитанного. Меньшие, чем расчетные значения для свободных ионов, РМ-вклады обнаружены в соединениях $\text{RBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ при $\delta \simeq 0.5$ для ($\text{R} = \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Nd}$) [8, 18, 23, 24]. Полученные выше зависимости $M(H)$, по-видимому, означают, что ионы Pr^{3+} в соединениях $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ нельзя считать невзаимодействующими с соседними ионами. Кроме того, в работе [17] вообще считается, что ионы Pr^{3+} в соединениях $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ находятся в немагнитном ($\text{LS}, S = 0$) состоянии, так как их вклад не заметен.

Для определения РМ-вклада ионов Pr^{3+} мы провели измерения магнитных свойств соединений $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$, $\delta \simeq 0.03$. В литературе

мы не нашли никаких сведений о магнитных свойствах $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.0}$. Мы ожидали, что соединение $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$, как и $\text{RBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$, где $\text{R} = \text{Tb}, \text{Dy}, \text{Ho}$, является антиферромагнетиком при $\delta = 0$ [31], и из измерений намагниченности в магнитном поле можно выделить РМ-вклад ионов Pr^{3+} . Ниже приведены результаты исследований намагниченности поликристалла $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.03}$ от 2 до 300 К в магнитном поле до 90 кЭ.

На вставке к рис. 3 приведены полевая зависимость намагниченности $M_{\text{Pr}^{3+}}(H)$ свободных ионов Pr^{3+} (кривая 1), определенная из выражения (2), и экспериментальные значения намагниченности $M_{\text{exp}}(H)$ кобальтита $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.03}$ (символы) при 2 К. Видно, что значения $M_{\text{exp}}(H)$ почти в 3 раза меньше намагниченности $M_{\text{Pr}^{3+}}(H)$ и не описываются выражением (2). Полевая зависимость намагниченности $M_{\text{exp}}(H)$ до $H \leq 60$ кЭ может быть описана выражением (3) при $\Theta = -34$ К (кривая 2):

$$M = N_A g \mu_B J B_S(x), \quad (3)$$

где $x = g \mu_B J H / k(T - \Theta)$.

На рис. 3 показана температурная зависимость экспериментальных значений намагниченности M_{exp} кобальтита $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.03}$ при $H = 50$ кЭ в интервале $T = 2$ –300 К. Видно, что поведение намагниченности имеет парамагнитный характер: намагниченность монотонно увеличивается с уменьшением температуры. РМ-вклад ионов Pr^{3+} (кривая 1), определенный из выражения (2), явно не описывает поведение $M_{\text{exp}}(T)$. РМ-вклад ионов Pr^{3+} , определенный из выражения (3) при $\Theta = -34$ К (кривая 2), существенно меньше значений $M_{\text{exp}}(T)$.

Соединение $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.03}$ не является «чистым» антиферромагнетиком, так как для него $\delta \neq 0$. Вследствие этого, кроме РМ-вклада ионов Pr^{3+} в магнитном поле должны наблюдаться вклады от ионов Co^{2+} и Co^{3+} . Кривая 3 показывает температурную зависимость величины ΔM , равной разности экспериментальных (кривая M_{exp}) и расчетных (кривая 2) значений намагниченности кобальтита $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.03}$. Видно, что значения ΔM до $T \simeq 20$ К монотонно увеличиваются, при $T = 50$ –300 К значения ΔM остаются почти постоянными, $\Delta M \simeq 0.06\mu_B$. Можно предположить, что в кобальтите $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.03}$ при 2 К и соотношении количества разновалентных ионов $\text{Co}^{2+} : \text{Co}^{3+} \simeq 0.47 : 0.53$ формируется АФМ-структура. В магнитном поле 50 кЭ образуется другая АФМ-структура с равными количеством ионов Co^{2+} и Co^{3+} , а при

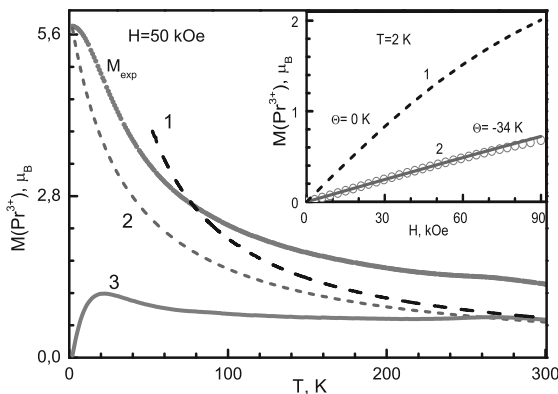


Рис. 3. Температурные зависимости намагниченности кобальтита $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.03}$ в магнитном поле $H = 50$ кЭ (M_{exp}): кривые 1 и 2 — расчет РМ-вклада ионов Pr^{3+} при $\Theta = 0, -34$ К, кривая 3 — вклад ионов Co^{2+} и Co^{3+} (см. текст). Вставка — полевые зависимости намагниченности кобальтита $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.03}$ при 2 К (символы): кривые 1 и 2 — расчет РМ-вклада ионов Pr^{3+} при $\Theta = 0, -34$ К

$\delta = 0.03$ и $T = 50\text{--}300$ К возникает намагниченность $\Delta M \simeq 0.06\mu_B$ с ионами Co^{3+} в промежуточном спиновом состоянии LS ($S = 1$) [31]. Эксперимент сравнительно неплохо подтверждает предположение.

Эти эксперименты показывают, что ионы Pr^{3+} в соединениях $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.0+\delta}$ не являются свободными ионами; они обладают магнитным моментом, взаимодействуют с соседними ионами и имеют РМ-характер температурного поведения намагниченности. РМ-вклад ионов Pr^{3+} (до $H \leq 50$ кЭ) хорошо описывается выражением (3) при $\Theta = -34$ К. Расчеты показывают, что симметричная петля гистерезиса $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.74}$ при 10 К может быть получена, если РМ-вклад иона Pr^{3+} описывается выражением (3) при $\Theta = -34$ К. Полевая зависимость намагниченности редкоземельных ионов $R = \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Nd}$ в слоистых кобальтитах $\text{RBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$, где $\delta \simeq 0.5$, также описывается выражением (3) при $\Theta = -1.4, -8, -18$ К соответственно [8, 18, 24]. РМ-вклад редкоземельных ионов значительно меньше рассчитанного. Малые магнитные моменты обнаружены в редкоземельных соединениях и солях, что характеризует отклонения от закона Кюри [32]. Одной из причин отклонения от закона Кюри может быть влияние кристаллического поля соседних ионов на орбитальный момент ионов [32]. В случае с Gd, который не имеет орбитального момента, значение Θ минимально. Малые магнитные моменты качественно можно объяснить тем, что валентные электроны в редкоземельных соединениях проявляют иные магнитные свойства, чем в металле.

Спиновое состояние ионов Co нами рассмотрено для обоих случаев. Для определения вклада ионов Co из намагниченности кобальтита $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.0+\delta}$ вычитали РМ-вклад как для свободных ионов Pr из выражения (2), так и для взаимодействующих ионов из выражения (3) при $\Theta = -34$ К. На рис. 3 видно, что кривые 1 и 2 с повышением температуры приближаются, но никогда не сойдутся. Наши расчеты показывают, что спиновое состояние ионов Co^{3+} для взаимодействующих ионов выше, чем для свободных ионов, но это различие не превышает экспериментальной ошибки определения эффективного магнитного момента $\Delta\mu_{\text{eff}} \simeq 0.1\mu_B$, и влиянием Θ на точность определения спиновых состояний можно пренебречь.

На рис. 4а и 4б (кривые 1 и 2) приведены экспериментальные значения обратной РМ-восприимчивости $\chi_{\text{exp}}^{-1}(T)$ и полученные после вычета РМ-вклада свободных ионов Pr^{3+} значения $\chi^{-1}(T)$ для поликристаллов $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.52}$ и $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.74}$. Значения эффективного магнитного момента ионов Co, полученные из описания поведения $\chi(T) \simeq \mu_{\text{eff}}^2/(T - \Theta_{\text{PM}})$ законом Кюри–Вейса с учетом и без учета РМ-вклада ионов Pr, обозначены ниже как μ_{eff} и μ_{exp} соответственно; здесь Θ_{PM} — парамагнитная температура Кюри–Вейса. Видно, что почти линейная зависимость $\chi^{-1}(T)$ в металлической фазе меняется на нелинейное поведение $\chi^{-1}(T)$ в непроводящей фазе ниже T_{MI} и T_{MSC} (кривые 1 на рис. 4а и 4б) в обоих образцах. Это означает, что поведение $\chi^{-1}(T)$ невозможно описать законом Кюри–Вейса при постоянном значении $\mu_{\text{eff}}(T)$, и переход сопровождается изменениями $\mu_{\text{eff}}(T)$ с температурой. Для определения особенностей перехода металл–изолятор были найдены значения $\chi^{-1}(T)$ и $\chi_{\text{exp}}^{-1}(T)$ с интервалом $\Delta T = 3$ К, и для каждого участка определены дифференциальные значения $\mu_{\text{eff}}^{\text{diff}}/\text{Co}$ и $\mu_{\text{exp}}^{\text{diff}}/\text{Co}$ (кривые 1 и 2 на рис. 4с и 4д).

Температурная зависимость $\chi^{-1}(T)$ соединения $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.52}$ типична для слоистых кобальтитов $\text{RBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ при $\delta \simeq 0.5$ [1–7]. Ниже 400 К значения $\chi^{-1}(T)$ меняются с температурой приблизительно линейно (рис. 4а). Линейное поведение $\chi^{-1}(T)$ соединения $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.52}$ в металлической фазе (символы 1 на рис. 4а) описывается законом Кюри–Вейса значениями $\mu_{\text{eff}}/\text{Co} = (3.28 \pm 0.05)\mu_B$ и парамагнитной температурой Кюри $\Theta_{\text{PM}} = -27$ К. Отрицательное значение Θ_{PM} соответствует ответственности АФМ-взаимодействий в этой области температур [1–7]. В непроводящей фазе (ниже T_{MI}) только в небольшом интервале температур

(от $T = 280\text{--}320\text{ K}$) наблюдается линейное поведение $\chi^{-1}(T)$, которое можно описать законом Кюри–Вейса со значениями $\mu_{eff}/\text{Co} = (1.8 \pm 0.05)\mu_B$ и $\Theta_{PM} = 263\text{ K}$ для соединения $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.52}$.

Дифференциальные значения $\mu_{eff}^{diff}/\text{Co}$ кобальтита $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.52}$ (символы 1 на рис. 4с) показывают немонотонное поведение: значение их постоянно, $\mu_{eff}^{diff}/\text{Co} \simeq (3.2 \pm 0.1)\mu_B$, в интервале температур от 400 до 370 K, резко уменьшаются до $\mu_{eff}^{diff}/\text{Co} \simeq 1.2\mu_B$ ниже $T_{ST} \simeq 356 \pm 2\text{ K}$, далее монотонно увеличиваются до $\mu_{eff}^{diff}/\text{Co} \simeq 1.8\mu_B$. Температура T_{ST} , при которой происходит резкое изменение наклона кривой $\chi^{-1}(T)$ (чему соответствует резкое уменьшение $\mu_{eff}^{diff}/\text{Co}$) считается температурой перехода металл–изолятор, определенной из спинового состояния. Эта температура ($T_{ST} \simeq 356 \pm 2\text{ K}$) примерно на 5 K превышает температуру $T_{MI} \simeq 350 \pm 2\text{ K}$ при $\delta = 0.52$ (см. рис. 1а). Эти расхождения объясняются влиянием межгранульного сопротивления поликристаллов. Аналогичные результаты получены для $\text{NdBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ [18]. Температурные зависимости μ_{eff}/Co и $\mu_{eff}^{diff}/\text{Co}$ согласуются в пределах указанных выше ошибок определения значений μ_{eff}/Co . В металлическом состоянии ($T = 370\text{--}400\text{ K}$) значению $\mu_{eff}/\text{Co} \simeq (3.2 \pm 0.10)\mu_B$ из всех возможных состояний ионов Co^{3+} (рис. 4с) ближе всех соответствует смесь состояний HS ($t_{2g}^4 e_g^2$, $S = 2$) и LS ($t_{2g}^6 e_g^0$, $S = 0$) с $\mu_{eff}/\text{Co} = 3.43\mu_B$ в равном соотношении. В полупроводниковой фазе значению $\mu_{eff}/\text{Co} \simeq (1.7 \pm 0.10)\mu_B$ ближе всех соответствует смесь состояний IS ($t_{2g}^5 e_g^1$, $S = 1$) и LS ($t_{2g}^6 e_g^0$, $S = 0$) в октаэдрах и пирамидах.

Дифференциальные значения $\mu_{exp}^{diff}/\text{Co}$ кобальтита $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.52}$, полученные из поведения χ_{exp}^{-1} примерно в 1.2–1.3 раза выше значений $\mu_{exp}^{diff}/\text{Co}$, полученных с учетом РМ-вклада иона Pr (кривые 1 и 2 на рис. 4с). Значения $\mu_{exp}/\text{Co} = (4.10 \pm 0.10)\mu_B$ в металлической фазе и значения μ_{exp}/Co от $2.35\mu_B$ до $2.2\mu_B$ в непроводящей фазе, полученные из линейного поведения χ_{exp}^{-1} на рис. 4б, согласуются с данными $\mu_{exp}^{diff}/\text{Co}$. Без учета РМ-вклада ионов Pr^{3+} в оксиде $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.52}$ ионы Co^{3+} должны находиться в металлической фазе в HS/IS-состоянии, а в полупроводниковой фазе в LS/IS-состоянии (кривая 2 на рис. 4с).

В работах [20–22] также полагают, что для кобальтита $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.50}$ с учетом вклада Паули и примесей и без учета РМ-вклада ионов Pr^{3+} ионы Co^{3+} находятся в HS/IS-состоянии в металлической фазе и LS/IS-состоянии в полупроводниковой фазе.

Магнитные данные не позволяют определить кислородное (октаэдрическое или пирамидальное) окружение ионов Co^{3+} . Синхротронные дифракционные данные сверхвысокого разрешения показывают расширение октаэдров и сжатие пирамид $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.50}$ при переходе в металлическую фазу [20]. Так как ионный радиус Co^{3+} увеличивается с увеличением спинового состояния, эти результаты можно трактовать как увеличение спинового состояния ионов Co^{3+} в октаэдрах и уменьшение их в пирамидах при переходе в металлическую фазу. Из двух методов определения спинового состояния ионов Co — с учетом (символы 1 на рис. 4с) или без учета (кривая 2 на рис. 4с) РМ-вклада ионов Pr — только первый согласуется со структурными данными. Тогда переход металл–изолятор в $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.52}$ должен происходить из HS/LS- в LS/IS-состояние при изменении спинового состояния ионов Co^{3+} из HS- в LS-состояние в октаэдрах, из LS- в IS-состояние в пирамидах.

Впервые использовать структурные данные — расширение октаэдров и сжатие пирамид в металлической фазе — для определения кислородного окружения ионов Co^{3+} предложено в работе [4]. К сожалению, в этой работе РМ-вклад ионов Gd^{3+} был определен неточно [23, 24]. Авторы определили спиновое состояние ионов Co^{3+} в $\text{GdBaCo}_2\text{O}_{5.50}$ как HS/IS-состояние в металлической фазе, IS/LS-состояние в полупроводниковой фазе. Предполагалось, что переход металл–изолятор происходит при изменении спинового состояния ионов Co^{3+} из HS- в LS-состояние в октаэдрах без изменения IS-состояния в пирамидах в противоречии со своими структурными данными в кобальтитах $\text{GdBaCo}_2\text{O}_{5.50}$ [4] и в $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.50}$ [20–22]. Эта модель нашла широкое признание, и многие исследователи придерживаются этой модели перехода металл–изолятор. Наши исследования $\text{RBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$, где $\delta \simeq 0.5$, $R = \text{Gd, Tb, Nd, Pr}$ [8, 23, 24] показывают, что при учете РМ-вклада ионов R переход металл–изолятор происходит при изменении спинового состояния из HS/LS- в LS/IS-состояние в согласии с известными структурными данными. Только в соединении $\text{LaBaCo}_2\text{O}_{5.50}$, в котором ионы La^{3+} имеют наибольший размер из редкоземельных элементов, не обладают магнитным моментом и не вносят РМ-вклада в намагниченность, переход металл–изолятор происходит при изменении спинового состояния из HS/IS- в LS/IS-состояние [12]. Размер редкоземельного иона влияет на кристаллическое поле на ионах Co, и, по-видимому, ионы La^{3+} оказывают влияние на спиновое состояние Co.

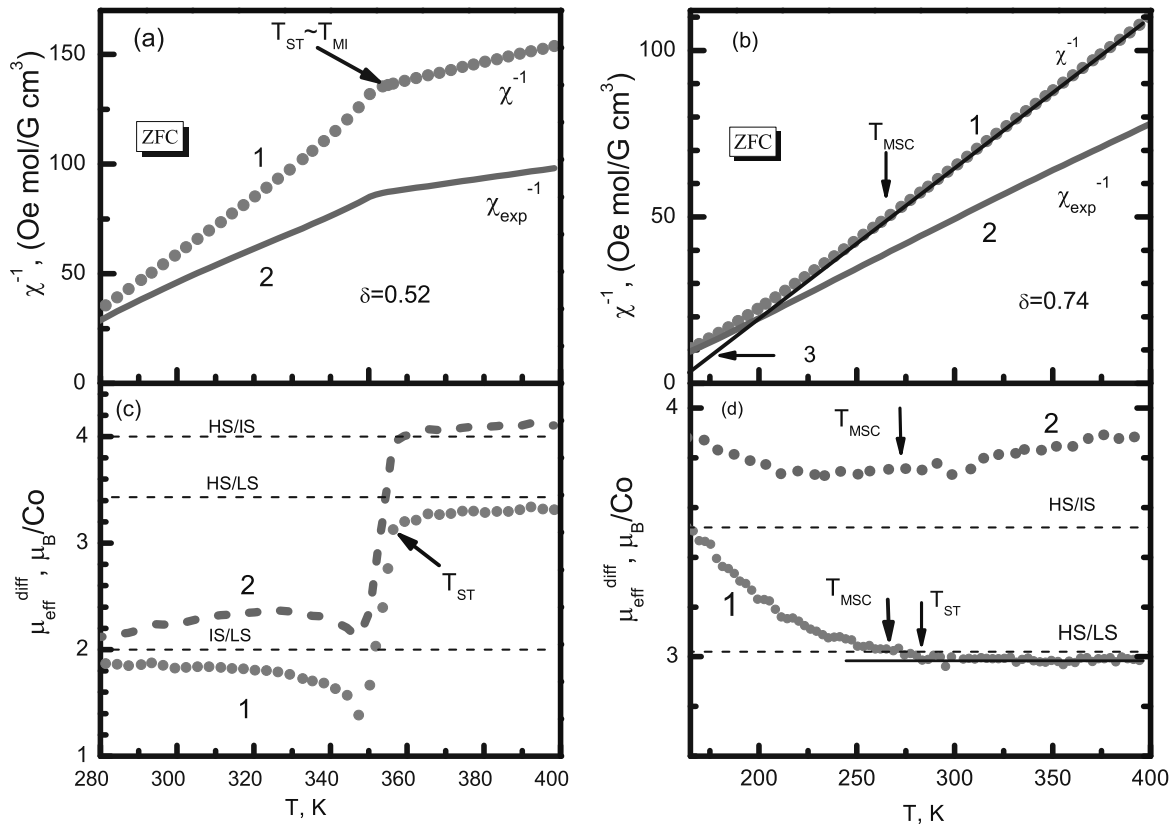


Рис. 4. Температурные зависимости обратной РМ-восприимчивости (χ^{-1}) кобальтитов $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.52}$ (а) и $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.74}$ (б) с учетом и без учета РМ-вклада ионов Pr^{3+} (кривые 1) и (2) соответственно, а также эффективного магнитного момента $\mu_{eff}^{diff}/\text{Co}$ кобальтитов $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.52}$ (с) и $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.74}$ (д) с учетом и без учета РМ-вклада ионов Pr^{3+} (кривые 1) и (2) соответственно)

На рис. 4b и 4d приведены результаты исследования спинового состояния ионов Co вблизи перехода металл–полупроводник оксида $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.74}$. Во всем интервале температур $T = 175\text{--}400\text{ K}$ (кривая 2 на рис. 4b) наблюдается линейное от температуры поведение $\chi_{exp}^{-1}(T)$, которое описывается законом Кюри–Вейса при постоянном значении $\mu_{eff}/\text{Co} = (3.67 \pm 0.05)\mu_B$ и $\Theta_{PM} = 135\text{ K}$. Приблизительно такими же постоянными значениями $\mu_{eff}/\text{Co} = (3.80 \pm 0.05)\mu_B$ и $\Theta_{PM} = 135 \pm 10\text{ K}$ описывается поведение $\chi_{exp}^{-1}(T)$ соединений $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.75(1)}$ в работе [17] при $T = 150\text{--}300\text{ K}$. Дифференциальные значения $\mu_{exp}^{diff}/\text{Co}(T)$, полученные из зависимости $\chi_{exp}^{-1}(T)$, показывают немонотонное поведение (кривая 2 на рис. 4d): значения $\mu_{exp}^{diff}/\text{Co}$ от 175 до 225 K уменьшаются, далее остаются почти постоянными до $T \simeq 300\text{ K}$, затем снова возрастают. Значения $\mu_{exp}^{diff}/\text{Co}(T)$, полученные без учета РМ-вклада, не обнаруживают ни металлического состояния в интервале

400–280 K, ни перехода металл–полупроводник при $T_{MSC} \simeq 270\text{ K}$ (см. рис. 1b).

В зависимости от температуры значения $\chi^{-1}(T)$ для соединения $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.74}$ (символы 1 на рис. 4b) изменяются плавно, без резких изменений. В интервале от $T = 400\text{ K}$ до $T \simeq 280\text{ K}$ значения $\chi^{-1}(T)$ уменьшаются пропорционально температуре. Ниже $T \simeq T_{MSC} = 280\text{ K}$ видно отклонение $\chi^{-1}(T)$ от линейной зависимости по температуре (линия 3). Дифференциальные значения эффективного момента в металлической фазе остаются приблизительно постоянными ($\mu_{eff}^{diff}/\text{Co} = (2.95 \pm 0.05)\mu_B$) от 400 K до температуры $T_{ST} \simeq 280\text{ K}$, близкой к температуре перехода металл–полупроводник $T_{MSC} = 270 \pm 10\text{ K}$ (см. рис. 1b).

Ниже $T_{ST} \simeq 280\text{ K}$ значения $\mu_{eff}^{diff}/\text{Co}$ монотонно увеличиваются до $\mu_{eff}^{diff}/\text{Co} \simeq 3.50\mu_B$ при $T \simeq 175\text{ K}$. В металлической фазе линейное по температуре поведение $\chi(T)$ хорошо описывается зако-

ном Кюри–Вейса с $\mu_{eff}/Co = (2.95 \pm 0.05)\mu_B$. В небольшом интервале температур вблизи $T = 175$ – 200 К линейное по температуре поведение $\chi^{-1}(T)$ описывается значением $\mu_{eff}/Co = (3.41 \pm 0.05)\mu_B$ в согласии с данными μ_{eff}^{diff}/Co . Таким образом, в металлической фазе значение $\mu_{eff}/Co \simeq 3\mu_B$ не зависит от температуры и увеличивается до $\mu_{eff}/Co \simeq 3.5\mu_B$ ниже $T_{ST} = 280 \pm 10$ К при переходе в полупроводниковую фазу при уменьшении температуры.

Если принять во внимание три спиновых состояния как Co^{3+} , так и Co^{4+} и наличие двух типов координации (пирамиды и октаэдры), то возникает несколько возможностей спиновых состояний ионов Co. В общем случае эффективный магнитный момент ионов μ_{eff}/Co можно определить из следующего выражения [1, 30]:

$$\mu_{eff}/Co = g[N_{Co^{4+}}^{oct}S_{Co^{4+}}(S_{Co^{4+}} + 1) + N_{Co^{3+}}^{oct}S_1(S_1 + 1) + N_{Co^{4+}}^{pyr}S_{Co^{4+}}(S_{Co^{4+}} + 1) + N_{Co^{3+}}^{pyr}S_2(S_2 + 1)]^{1/2}, \quad (4)$$

где $g = 2$, $N_{Co^{4+}}^{oct}$, $N_{Co^{4+}}^{pyr}$, $N_{Co^{3+}}^{oct}$, $N_{Co^{3+}}^{pyr}$ — количество ионов Co^{4+} и Co^{3+} в октаэдрах и пирамидах, S_1 и S_2 — спиновые состояния ионов Co^{3+} в октаэдрах и пирамидах соответственно, $S_{Co^{4+}}$ — спиновое состояние ионов Co^{4+} в октаэдрах.

Учтены некоторые факты и сделаны следующие предположения.

1. Ион Co^{4+} с большей степенью ковалентности предпочитает более крупную — октаэдрическую — координацию [17], ионы Co^{4+} присутствуют только в октаэдрах и отсутствуют в пирамидах, $N_{Co^{4+}}^{oct} = \delta - 0.5$, $N_{Co^{4+}}^{pyr} = 0$.

2. Четырехвалентный ион Co^{4+} в слоистых кобальтатах всегда находится в LS-состоянии ($t_{2g}^5 e_g^0$, $S = 1/2$) из-за сильного кристаллического поля [25].

3. Количество ионов Co^{3+} уменьшается за счет замещения их ионами Co^{4+} .

4. При $\delta \simeq 0.75$ ионы Co^{3+} и Co^{4+} сосуществуют в соотношении 3 : 1. Из условий электронейтральности следует, что $N_{Co^{3+}}^{oct} + N_{Co^{3+}}^{pyr} = 1.5 - \delta \simeq \delta$.

Тогда выражение (4) принимает вид

$$\mu_{eff}/Co = g[N_{Co^{4+}}^{oct}S_{Co^{4+}}(S_{Co^{4+}} + 1) + N_{Co^{3+}}^{oct}S_1(S_1 + 1) + (\delta - N_{Co^{3+}}^{oct})S_2(S_2 + 1)]^{1/2}. \quad (5)$$

При этих предположениях можно получить значение $\mu_{eff}/Co \simeq 3\mu_B$ в металлической фазе, если $1/4$

мест ионов Co занимают ионы Co^{4+} в LS-состоянии ($S = 1/2$), примерно 0.35 ионов Co^{3+} в HS-состоянии ($S = 2$) занимают места в октаэдрах, а 0.40 ионов Co^{3+} в LS-состоянии ($S = 0$) расположены в пирамидах. Тогда переход металл–полупроводник объясняется изменением спинового состояния ионов Co^{3+} из HS/LS- в HS/IS-состояние при изменении их состояния из LS ($t_{2g}^6 e_g^0$) в IS ($t_{2g}^5 e_g^1$) в пирамидах без изменений спинового состояния ионов Co^{3+} и Co^{4+} в октаэдрах.

На рис. 4d показаны расчетные значения $\mu_{eff}/Co = 3.02\mu_B$, $3.57\mu_B$ для HS/LS- и HS/IS-состояний ионов Co^{3+} при соотношении $Co^{4+} : Co^{3+} = 1 : 3$ ($\delta = 0.75$) из выражения (5). Значения $\mu_{eff}/Co = (2.95 \pm 0.05)\mu_B$ в металлической фазе, плавное возрастание $\mu_{eff}^{diff}/Co(T)$ при понижении температуры, близость температур изменения спинового состояния $T_{ST} \simeq 280$ К и перехода металл–полупроводник $T_{MSC} \simeq 270$ К хорошо согласуются с предлагаемой моделью.

Предложенная схема спиновых переходов объясняет результаты отрицательного коэффициента объемного расширения в $PrBaCo_2O_{5.74}$ [26]. Объем элементарной ячейки поликристаллов $PrBaCo_2O_{5.74}$ от 300 К до $T \simeq 150$ К уменьшается, далее увеличивается [26]. Дифференцированием объема элементарной ячейки dV/dT обнаружен отрицательный коэффициент объемного расширения в интервале температур $T = 100$ – 150 К. Полагаем, что результаты согласуются с увеличением спинового состояния ионов Co при понижении температуры. Так как ионный радиус Co^{3+} увеличивается с увеличением спинового состояния, переход из LS- в IS-состояние приводит к расширению образца, что на фоне теплового уменьшения решетки приводит увеличению объема решетки и к отрицательному коэффициенту объемного расширения при низких температурах. Материалы с отрицательным тепловым расширением имеют большое промышленное значение.

Спонтанный момент при низких температурах $M \simeq 0.7\mu_B/Co$, оцененный из намагниченности насыщения поликристаллов $PrBaCo_2O_{5.74}$ (см. вставку к рис. 2b), в предложенной модели спиновых состояний ионов Co можно объяснить ферримагнитным расположением ионов Co в октаэдрах и пирамидах и РМ-вкладом ионов Pr^{3+} . В работе [17] не было обнаружено никаких особенностей в эволюции объема решетки в $PrBaCo_2O_{5.75}$, которые могли бы свидетельствовать об изменениях спинового состояния ионов Co. Это не удивительно, так как исследования проведены ниже температуры перехода

металл–полупроводник $T_{MSC} \simeq 300$ К. В этой области температур спиновое состояние ионов Co меняется монотонно (кривая 1 на рис 4d). Мы полагаем, что при исследовании температурной зависимости объема решетки ниже $T \simeq 400$ К можно было бы обнаружить изменение спинового состояния ионов Co при $T \simeq 300$ К.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящее время роль редкоземельных ионов в ФМ-состоянии слоистых кобальтитов не выяснена. Эксперименты показывают, что редкоземельные ионы не являются свободными, они взаимодействуют с соседними ионами, обладают магнитным моментом и имеют РМ-вид температурного поведения намагниченности. В большинстве работ магнитные данные при низких температурах анализируются без учета влияния редкоземельных ионов [11, 17, 33, 34]. Известна только одна работа, в которой предполагается, что в $\text{NdBaCo}_2\text{O}_{5.75}$ подрешетки как Nd, так и Co упорядочены ФМ-связью внутри подрешеток и АФМ-связью между ними, образуя общую ферромагнитную структуру [35]. Возникновение ФМ-взаимодействий ниже T_C в слоистых оксидах $\text{RBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ на основе $R = \text{Nd, Pr, La}$ [8, 11, 12] показывает, что магнитное состояние в них гораздо сложнее, чем в других оксидах. Проблема усложняется при $\delta > 0.5$, когда одновременно сосуществуют ионы Co^{3+} и Co^{4+} . Определение магнитного и спинового состояний таких соединений при низких температурах требует приготовления совершенных кристаллов и дополнительных (нейтронных, рентгеновских и магнитных) исследований.

Проведенные исследования позволяют предложить следующую схему спиновых переходов ионов Co в $\text{RBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ при увеличении содержания кислорода.

1. Спиновое состояние ионов Co^{3+} в металлической фазе $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$, $\delta = 0.52, 0.74$ при увеличении содержания кислорода остается неизменным: ионы Co^{3+} остаются в HS-состоянии в октаэдрах и в LS-состоянии в пирамидах. Количество мест ионов Co^{3+} уменьшается за счет замещения их ионами Co^{4+} в LS-состоянии ($t_{2g}^5 e_g^0$, $S = 1/2$).

2. Переход из металлического в полупроводниковое состояние в $\text{RBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ при $\delta \simeq 0.50$ происходит при изменении спинового состояния ионов Co^{3+} из HS ($S = 2$) в LS ($S = 0$) в октаэдрах и из

LS ($S = 0$) в IS ($S = 1$) в пирамидах в согласии с известными структурными данными.

3. Переход из металлического в полупроводниковое состояние в $\text{RBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ при $\delta \simeq 0.75$ происходит при изменении спинового состояния ионов Co^{3+} из HS/LS- в HS/IS-состояние. При этом спиновые состояния ионов Co^{3+} (HS, $S = 2$) и Co^{4+} (LS, $S = 1/2$) в октаэдрах остаются неизменными, а в пирамидах при понижении температуры ионы Co^{3+} плавно переходят из LS-состояния ($S = 0$) в IS-состояние ($S = 1$).

Финансирование. Работа выполнена в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (темы «Спин», № 122021000036-3 и «Электрон», № 122021000039-4). Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП «Испытательный центр нанотехнологий и перспективных материалов» ИФМ УрО РАН. Благодарим А. С. Волегова за проведение некоторых магнитных измерений с использованием оборудования PPMS DynaCool T9 УЦКП «Современные нанотехнологии» УрФУ (рег. № 2968), при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Проект № 075-15-2021-677).

ЛИТЕРАТУРА

1. A. Maignan, C. Martin, D. Pelloquin et al., J. Sol. St. Chem. **142**, 247 (1999).
2. C. Martin, A. Maignan, D. Pelloquin et al., Appl. Phys. Lett. **71**, 1421 (1997).
3. A. A. Taskin, A. N. Lavrov, and Yoichi Ando, Phys. Rev. B **71**, 134414 (2005).
4. C. Frontera, J. L. García-Munoz, A. Llobet et al., Phys. Rev. B **65**, 180405(R) (2002).
5. Y. Moritomo, T. Akimoto, M. Takeo et. al., Phys. Rev. B **61**, 13325(R) (2000).
6. Z. X. Zhou and P. Schlottmann, Phys. Rev. B **71**, 174401 (2005).
7. M. Baran, V. I. Gatal'skaya, R. Szymczak et al., J. Phys.: Condensed Matter **15**, 8853 (2003).
8. Н. И. Солин, С. В. Наумов, Письма в ЖЭТФ **114**, 179 (2021).
9. Н. Ф. Мотт, *Переходы металл–изолятор*, Наука, Москва (1979).
10. Н. Б. Иванова, С. Г. Овчинников, М. М. Коршунов и др., УФН **179**, 837 (2009).

11. S. Ganorkar, K. R. Priolkar, P. R. Sarode, and A. Banerjee, J. Appl. Phys. **110**, 053923 (2011).
12. E.-L. Rautama, V. Caignaert, Ph. Boullay et al., Chem. Matter **21**, 102 (2009).
13. H. D. Zhou and J. B. Goodenough, J. Sol. St. Chem. **177**, 3339 (2004).
14. A. Jarry, H. Luetkens, Y. G. Pashkevich et al., Physica B **404**, 765 (2009).
15. L. Landau, Phys. Zs. Sowjet. **4**, 675 (1933).
16. F. Fauth, E. Suard, V. Caignaert, and I. Mirebeau, Phys. Rev. B **66**, 184421 (2002).
17. C. Frontera, J. L. García-Munoz, and A. E. Carillo, Phys. Rev. B **70**, 18428 (2004).
18. Н. И. Солин и С. В. Наумов, Письма в ЖЭТФ **115**, 531 (2022).
19. P. Miao, X. Lin, S. Lee et al., Phys. Rev. B **95**, 125123 (2017).
20. C. Frontera, J. L. García-Munoz, A. E. Carillo et al., Phys. Rev. B **74**, 054406 (2006).
21. C. Frontera, J. L. García-Munoz, A. E. Carillo et al., JMMM **316**, e731 (2007).
22. C. Frontera, J. L. García-Munoz, O. Castaño et al., J. Phys.: Condens. Matter **20**, 104228 (2008).
23. Н. И. Солин, С. В. Наумов, С. В. Телегин, Письма в ЖЭТФ **107**, 206 (2018).
24. Н. И. Солин, С. В. Наумов, ЖЭТФ **157**, 824 (2020).
25. A. A. Taskin and Yoichi Ando, Phys. Rev. Lett. **95**, 176603 (2005).
26. P. Miao, X. Lin, A. Koda et al., Adv. Mater. **29**, 1605991 (2017).
27. E.-L. Rautama and M. Karppinen, J. Sol. St. Chem. **183**, 1102 (2010).
28. Д. Гуденаф, *Магнетизм и химическая связь*, Металлургия, Москва (1966).
29. S. Roy, M. Khan, Y. Q. Guo, J. Craig, and N. Ali, Phys. Rev. B **65**, 064437 (2002).
30. Дж. Сمارт, *Эффективное поле в теории магнетизма*, Мир, Москва (1968).
31. F. Fauth, E. Suard, V. Caignaert, B. Domengès, I. Mirebeau, and L. Keller, Eur. Phys. J. B **21**, 163 (2001).
32. С. В. Вонсовский, *Магнетизм*, Наука, Москва (1971), гл. 9.
33. Md. M. Seikh, V. Pralong, O. I. Lebedev, V. Caignaert, and B. Raveau, J. Appl. Phys. **114**, 013902 (2013).
34. V. Pralong, V. Caignaert, S. Hebert, A. Maignan, and B. Raveau, Solid State Ionics **177**, 1879 (2006).
35. D. D. Khalyavin, O. Prokhnenko, N. Stüßer et al., Phys. Rev. B **77**, 174417 (2008).

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЭФФЕКТОВ КОНКУРЕНЦИИ РАЗЛИЧНЫХ ТИПОВ АНИЗОТРОПИИ НА КРИТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ МУЛЬТИСЛОЙНЫХ МАГНИТНЫХ СТРУКТУР

А. В. Минькова^{a*}, В. В. Прудников^a, П. В. Прудников^{b,a}

^a Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского
644077, Омск, Россия

^b Центр новых химических технологий, Институт катализа
Сибирского отделения Российской академии наук
644040, Омск, Россия

Поступила в редакцию 26 декабря 2022 г.,
после переработки 30 мая 2023 г.
Принята к публикации 31 мая 2023 г.

Исследовано влияние конкуренции одноионной анизотропии и анизотропии типа «легкая плоскость» на магнитные свойства мультислойной структуры Co/Cu/Co. Особенности влияния эффектов анизотропии были выявлены как в окрестности критической температуры T_c , так и в низкотемпературной области $T \ll T_c$. Численное моделирование магнитных свойств мультислойной структуры было осуществлено с применением анизотропной модели Гейзенберга. Показано, что в окрестности T_c анизотропия типа «легкая плоскость» оказывает преимущественное воздействие на магнитные свойства структуры по сравнению с влиянием одноионной анизотропии. В низкотемпературной области процесс переключения магнитного состояния ферромагнитной пленки во внешнем поле приводит к возникновению особенностей в гистерезисных эффектах, обусловленных конкуренцией типов магнитной анизотропии. Магнитная структура демонстрирует размерный переход от поведения, задаваемого анизотропией типа «легкая плоскость», к поведению с определяющим влиянием одноионной анизотропии. Выявленный размерный переход сопровождается спин-флоп-эффектом.

DOI: 10.31857/S0044451023110081

EDN: PJKVKX

1. ВВЕДЕНИЕ

Ультратонкие магнитные пленки имеют широкое применение в изготовлении магнитных носителей записи, при использовании не зависящей от энергии магниторезистивной оперативной памяти [1], для создания биосенсоров на основе гигантского магнитосопротивления [2, 3], а также являются перспективными кандидатами для применения в устройствах спинтроники [4, 5].

Особые свойства возникают прежде всего из-за малой толщины пленок, когда можно говорить о возможности проявления размерных эффектов в свойствах пленок, например, таких как зависимость критической температуры от числа слоев

пленки [6, 7]. Изменяя толщину ультратонких магнитных пленок, можно влиять на их поверхностные свойства и эффекты межфазного взаимодействия, роль которых становится существенной с уменьшением линейных размеров материалов. Для магнитных структур размерность системы определяет ее класс универсальности, характеризующий совокупность явлений упорядочения на различных масштабах длины. Увеличение толщины пленок усиливает в них объемные свойства, а уменьшение числа слоев пленки приводит к более ярко выраженным поверхностным эффектам [8].

Магнитные свойства ультратонких магнитных пленок обладают особой чувствительностью к эффектам поверхностной анизотропии, создаваемой кристаллическим полем подложки. Магнитная анизотропия является фундаментальным свойством магнитных пленок. Она характеризуется ориентацией осей легкого намагничивания, энергетическими

* E-mail: MinkovaAV@omsu.ru

константами или напряженностью ее эффективного поля. Магнитная анизотропия возникает из-за нарушения симметрии на границах раздела ферромагнитных и немагнитных материалов при возникновении напряжений из-за несоответствия параметров кристаллических решеток и различий в симметрии [6, 9]. Магнитную анизотропию можно регулировать, изменяя толщину пленок или подбирая материалы с более высоким или более низким значением констант анизотропии [10].

В статье [11] было проведено моделирование критического поведения мультислойной магнитной структуры методами Монте-Карло с использованием анизотропной модели Гейзенберга. Было описано влияние анизотропии на критическое поведение гейзенберговской тонкой пленки. При отдельном рассмотрении влияния одноионной анизотропии были рассчитаны критические индексы и исследованы равновесные свойства системы, а при учете влияния анизотропии типа «легкая плоскость» были исследованы неравновесные характеристики, а также выявлены эффекты старения.

В данной работе представлено исследование конкурентного влияния двух вкладов анизотропии — анизотропии типа «легкая плоскость» и одноионной анизотропии на критическое поведение мультислойной магнитной структуры. Рассматриваемая структура Co/Cu/Co хорошо подходит для данного исследования, так как прослойка из меди создает для пленки кобальта легкоплоскостной тип анизотропии. Методы компьютерного моделирования позволяют независимо рассмотреть вклады анизотропии для данной структуры. Кобальт обладает высокой критической температурой, что дает возможность рассматривать широкий температурный диапазон [12].

2. ОПИСАНИЕ ИССЛЕДУЕМОЙ МУЛЬТИСЛОЙНОЙ СТРУКТУРЫ

Для моделирования магнитных свойств структуры Co/Cu/Co используется трехмерная анизотропная модель Гейзенберга с учетом влияния двух типов анизотропии. Модель рассматриваемой мультислойной структуры состоит из двух ферромагнитных пленок, разделенных немагнитной прослойкой. Схематичное изображение данной структуры представлено на рис. 1. Толщина немагнитной прослойки подобрана таким образом, чтобы дальнотействующее взаимодействие между ферромагнитными пленками носило эффективный антиферромагнитный характер [13].

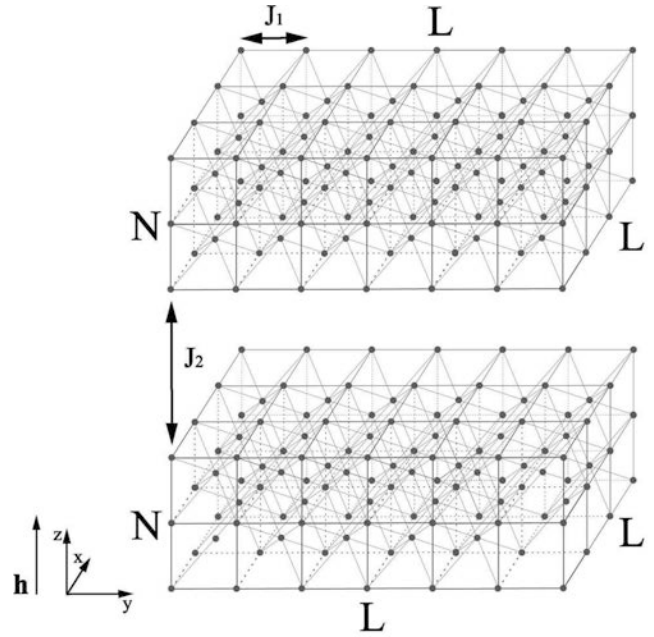


Рис. 1. Модель мультислойной структуры, состоящая из двух ферромагнитных пленок, разделенных немагнитной прослойкой

Гамильтониан анизотропной модели Гейзенберга задается следующим выражением:

$$H = -J_1 \sum_{i,j \in N_1, N_2} [\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \Delta S_i^z S_j^z] - J_2 \sum_{\alpha \in N_1, \beta \in N_2} [\mathbf{S}_\alpha \mathbf{S}_\beta - \Delta S_\alpha^z S_\beta^z] - A \sum_{i \in N_1, N_2} (S_i^z)^2 - \mathbf{h} \sum_{i \in N_1, N_2} \mathbf{S}_i, \quad (1)$$

где J_1 — интеграл внутрислоевого обменного взаимодействия, J_2 — интеграл междослового обменного взаимодействия, A характеризует одноионную анизотропию, $\mathbf{h}$ — приложенное магнитное поле, $\Delta(N_k)$ — параметр анизотропии «легкая плоскость», характеризующий ее величину, N — толщина пленки, N_1 и N_2 — первая и вторая пленки трехплочной мультислойной структуры соответственно, $\mathbf{S}$ — трехмерный классический спин в решетке. Немагнитная прослойка между пленками задается интегралом междослового обменного взаимодействия J_2 .

Параметр анизотропии типа «легкая плоскость» зависит от числа слоев пленки:

$$\begin{aligned} \Delta(N=3) &= 0.652, & \Delta(N=5) &= 0.487, \\ \Delta(N=7) &= 0.378, & \Delta(N=9) &= 0.297, \\ \Delta(N=11) &= 0.232 & (\text{см. рис. 2}). \end{aligned}$$

Особенность данной работы заключается в исследовании эффектов конкуренции и совместного влияния двух типов анизотропии — анизотропии типа

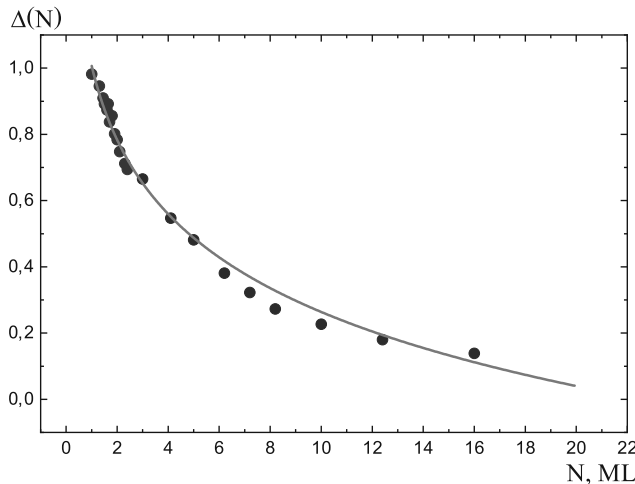


Рис. 2. Значение параметра анизотропии типа «легкая плоскость» для структуры Co/Cu/Co в зависимости от числа слоев пленки [11]. Точки соответствуют экспериментальным данным [12]

«легкая плоскость», определяемой парными взаимодействиями ионов пленки и подложки, и одноионной анизотропии, задаваемой отдельными ионами. Значения параметра A одноионной анизотропии брались в оптимальном диапазоне, определяемом условиями моделирования, а значения параметра $\Delta(N)$ анизотропии типа «легкая плоскость», зависящие от толщины N ультратонкой магнитной пленки, выбирались в соответствии с аппроксимацией результатов экспериментальных измерений критической температуры $T_c(N)$ в пленке кобальта для системы Co/Cu, данные для которых представлены на рис. 2.

Для определения температур магнитного упорядочения в структурах с различными толщинами ферромагнитных пленок $T_c(N)$ было проведено моделирование намагниченности $M(T, N, L)$ и магнитной восприимчивости $\chi(T, N, L)$ для каждой ферромагнитной пленки в структуре, задаваемых соотношениями

$$M(T, N, L) = \frac{1}{NL^2} \left\langle \sum_{i=1}^N (S_i^x{}^2 + S_i^y{}^2 + S_i^z{}^2)^{1/2} \right\rangle, \quad (2)$$

$$\chi(T, N, L) = \frac{\langle M(L)^2 \rangle - \langle M(L) \rangle^2}{TNL^2}. \quad (3)$$

Расчет критической температуры $T_c(N)$ в структуре осуществлялся по температурам пиков $T_c(N, L)$ восприимчивости $\chi(T, N, L)$ для пленки с фиксированной толщиной N в единицах монослоев (ML) и различными линейными размерами L пленки ($L = 32, 48, 64$) с реализацией затем предельной аппроксимации $T_c(N, L \rightarrow \infty)$.

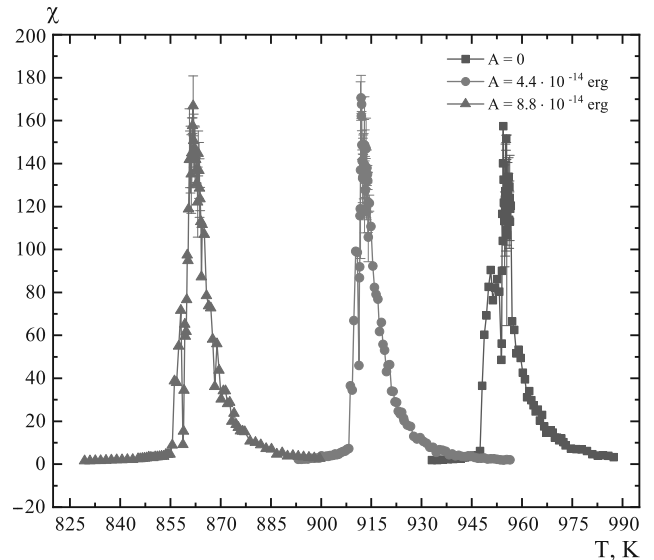


Рис. 3. Результаты моделирования восприимчивости χ в зависимости от температуры T для параметров одноионной анизотропии $A = 0, 4.4 \cdot 10^{-14}, 8.8 \cdot 10^{-14}$ эрг, числа слоев пленки $N = 5$ ML при линейном размере $L = 64$

Температура при моделировании методами Монте-Карло задается в единицах интеграла внутрислоевого взаимодействия J_1/k_B со значением $J_1 = 4.4 \cdot 10^{-14}$ эрг для Co [14]. Обменный интеграл межслоевого взаимодействия вводился как $J_2 = -0.3J_1$. Значения параметра одноионной анизотропии выбирались $A = 0, 4.4 \cdot 10^{-14}, 8.8 \cdot 10^{-14}$ эрг.

Отметим, что значения параметров анизотропии $\Delta(N)$ и A оказывают значительное влияние на температуры магнитного порядка $T_c(N)$ в структурах, и, лишь зная критические температуры, можно осуществлять изучение магнитных свойств данных структур.

Для наглядного представления результатов моделирования по определению критических температур ниже в качестве примера рассмотрена структура с толщиной ферромагнитных пленок $N = 5$ ML. На рис. 3 представлены рассчитанные температурные зависимости восприимчивости для данной структуры с линейными размерами пленок $L = 64$ для трех значений параметра A одноионной анизотропии. На рис. 4 показаны детали процедуры получения критической температуры $T_c(N = 5)$ при экстраполяции $L \rightarrow \infty$ для значений $T_c(N, L)$, полученных по пикам восприимчивости пленок с линейными размерами $L = 32, 48, 64$. С увеличением линейного размера L пики восприимчивости смещаются в область более высоких температур, а их значения увеличиваются.

В результате были получены значения критических температур при различных параметрах

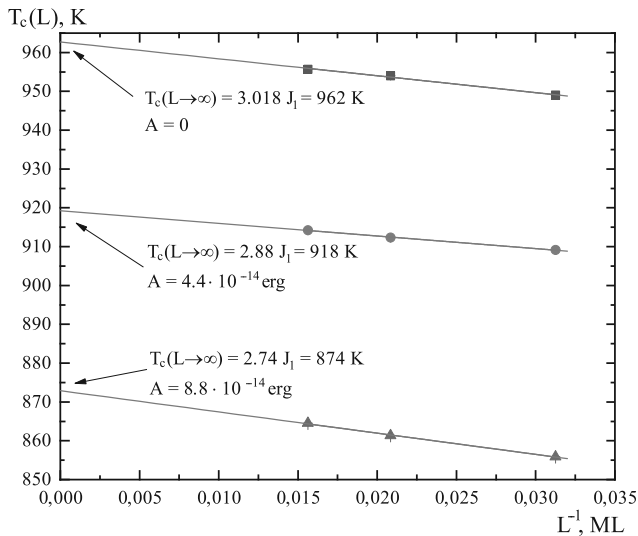


Рис. 4. Значения критической температуры T_c при разных значениях параметра одноионной анизотропии $A = 0, 4.4 \cdot 10^{-14}, 8.8 \cdot 10^{-14}$ эрг и толщинах каждой пленки $N = 5$ ML при $L \rightarrow \infty$

одноионной анизотропии: при $A = 0$ значение критической температуры $T_c = 3.018 J_1/k_B$, при $A = 1.0 J_1$ имеем $T_c = 2.88 J_1/k_B$, а при $A = 2.0 J_1$ имеем $T_c = 2.74 J_1/k_B$. Используя значение $J_1 = 4 \cdot 10^{-14}$ эрг [14], получим, что $T_c(A = 0) = 962$ К, $T_c(A = 4.4 \cdot 10^{-14}$ эрг) = 918 К и $T_c(A = 8.8 \cdot 10^{-14}$ эрг) = 874 К. Критическая температура для объемного кобальта заметно выше и составляет $T_c(\text{Co}) = 1388$ К [15].

3. ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ КОНКУРЕНЦИИ ДВУХ ТИПОВ АНИЗОТРОПИИ НА ПОВЕДЕНИЕ МУЛЬТИСЛОЙНОЙ МАГНИТНОЙ СТРУКТУРЫ

Эффекты магнитной анизотропии наиболее наглядно проявляются при воздействии на систему внешнего поля, что можно наблюдать при исследовании эффектов гистерезиса. Для компьютерного моделирования петель гистерезиса, представленных на рис. 5, 6, было выбрано число слоев в каждой ферромагнитной пленке $N = 3, 5, 7$ и 9 ML. Были выбраны значения обменных интегралов внутрислоевого и междоуровневого взаимодействия $J_1/k_b T = 1.0$ и $J_2/J_1 = -0.3$ соответственно. На основе проведенных расчетов (рис. 3, 4) значение температуры выбиралось как $T = 0.8 J_1/k_b = 255.2$ К. Для исследования эффектов анизотропии при изменении числа слоев пленки выбиралось значение параметра одноионной анизотропии $A = 8.8 \cdot 10^{-14}$ эрг, при котором значение критической температуры системы $T_c = 874$ К. Результаты моделирования на-

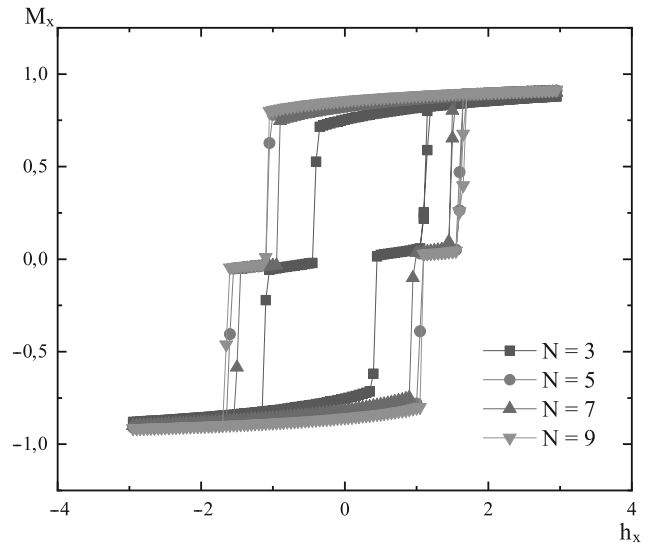


Рис. 5. Результаты моделирования намагниченности M_x в зависимости от приложенного магнитного поля h_x для разных толщин пленки $N = 3, 5, 7, 9$ ML

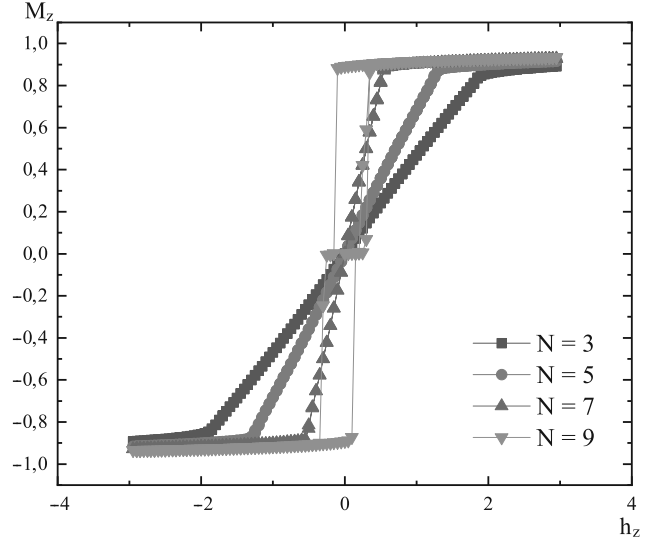


Рис. 6. Результаты моделирования намагниченности M_z в зависимости от приложенного магнитного поля h_z для разных толщин пленки $N = 3, 5, 7, 9$ ML

магниченности M_x в зависимости от приложенного магнитного поля h_x для разных толщин пленки $N = 3, 5, 7, 9$ ML представлены на рис. 5. В данном случае сказывается зависимость критической температуры $T_c(N)$ от толщины ферромагнитных пленок N в структуре и их относительной удаленности от температуры $T = 0.8 J_1/k_b = 255.2$ К, при которой исследовались гистерезисные явления.

Результаты моделирования поведения структуры с такими же параметрами, но при воздействии магнитного поля h_z , перпендикулярного плоскости пленок, на составляющую намагниченности M_z можно увидеть на рис. 6. Для понимания наблю-

даемых эффектов важно, что значения параметра анизотропии $\Delta(N)$ типа «легкая плоскость» убывают с увеличением числа слоев пленки N (рис. 2). Как следует из данных, представленных на рис. 6, с возрастанием толщины пленок и, соответственно, с уменьшением параметра анизотропии типа «легкая плоскость» петля становится уже, а затем «схлопывается». Это значит, что перемагничивание ультратонкой магнитной пленки происходит быстрее, а эффекты одноионной анизотропии становятся сильнее. Также можно наблюдать, как с уменьшением параметра анизотропии типа «легкая плоскость» и с увеличением толщины пленок заметно меняется наклон выхода намагниченности на насыщение. Можно заметить, как слабее проявляются эффекты анизотропии типа «легкая плоскость» и как усиливается влияние одноионной анизотропии под действием поля h_z , направленного вдоль оси одноионной анизотропии. Так же сказывается наличие зависимости критической температуры T_c от числа слоев тонкой пленки.

Как видно на рис. 6, для структуры с наибольшей толщиной пленок $N = 9$ ML под действием поля h_z возникает петлеобразное поведение. Мы связываем с таким поведением намагниченности в структуре с конкурирующими типами магнитной анизотропии ориентационный размерный переход, проявляющийся в том, что при увеличении толщины пленок эффекты анизотропии типа «легкая плоскость» существенно слабее влияют на поведение структуры, чем одноионная анизотропия, под действием поля вдоль оси одноионной анизотропии. Данные, представленные на рис. 5, 6, демонстрируют спин-флоп-эффект, который заключается в переориентации намагниченностей исследуемых пленок искусственной антиферромагнитной структуры [16].

Нами было также проведено исследование влияния изменения направления одноионной анизотропии при различных значениях ее параметра с учетом присутствия анизотропии типа «легкая плоскость». Для структуры с толщинами ферромагнитных пленок $N = 5$ ML в качестве параметров компьютерного моделирования использовались следующие: значение обменного интеграла внутрислового взаимодействия $J_1/k_b T = 1.0$, значение обменного интеграла межслового взаимодействия $J_2/J_1 = -0.3$, значение температуры $T = 255.2$ K. Значения параметра одноионной анизотропии брались следующими:

$$A = -8.8 \cdot 10^{-14}, -4.4 \cdot 10^{-14}, 0, 4.4 \cdot 10^{-14}, \\ 8.8 \cdot 10^{-14}, 13.2 \cdot 10^{-14}, 17.6 \cdot 10^{-14} \text{ эрг.}$$

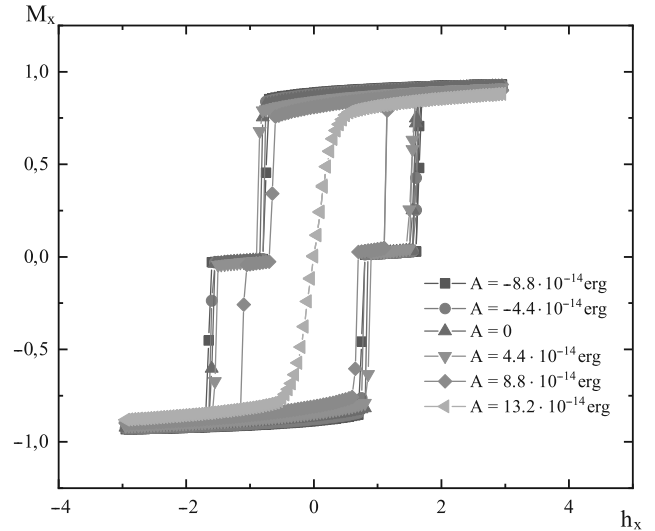


Рис. 7. Результаты моделирования намагниченности M_x в зависимости от приложенного магнитного поля h_x с различными значениями параметра одноионной анизотропии

На рис. 7 представлены результаты зависимости намагниченности M_x от приложенного магнитного поля h_x для различных значений параметра одноионной анизотропии.

Из графиков, представленных на рис. 7, следует, что анизотропии A оказывают незначительное влияние на гистерезисные эффекты в структуре. Это обусловлено тем, что при отрицательных значениях A одноионная анизотропия и анизотропия «легкая плоскость» не являются конкурирующими, а обе способствуют энергетически выгодной ориентации намагниченности в плоскости пленок. Однако при положительном знаке параметра A наблюдаются изменения в гистерезисных эффектах и с увеличением значения параметра одноионной анизотропии A пленка быстрее перемагничивается, а также меняется наклон выхода намагниченности на насыщение. При достаточно большом значении $A = 13.2 \cdot 10^{-14}$ эрг перемагничивание происходит достаточно быстро.

Рассмотрим теперь результаты численного моделирования при направлении поля вдоль оси z . Как видно на рис. 8, с увеличением значения параметра одноионной анизотропии направление намагниченности меняется. Если при значениях параметра одноионной анизотропии $A = -8.8 \cdot 10^{-14}, -4.4 \cdot 10^{-14}, 0, 4.4 \cdot 10^{-14}, 8.8 \cdot 10^{-14}$ эрг намагниченность ориентируется в плоскости пленки, то при $A = 13.2 \cdot 10^{-14}, 17.6 \cdot 10^{-14}$ эрг намагниченность начинает ориентироваться вдоль оси, перпендикулярной плоскости пленки, что и демонстрирует преимущественное влияние одноионной анизотропии в данном случае. Полученные

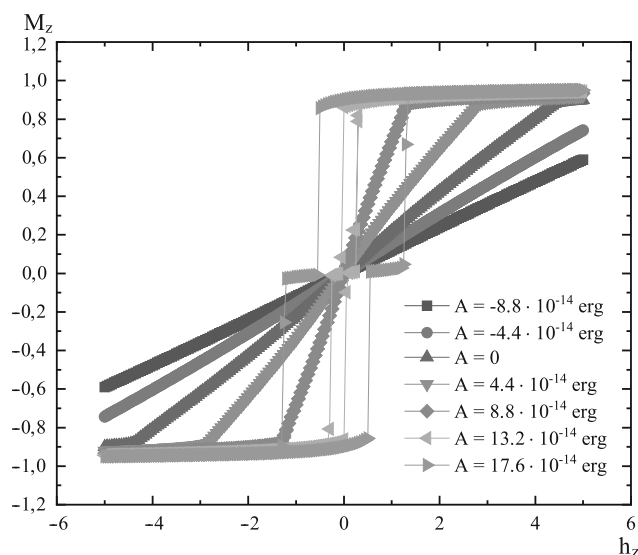


Рис. 8. Результаты моделирования намагниченности M_z от приложенного магнитного поля h_z с различными значениями параметра одноионной анизотропии

результаты на рис. 7, 8 также говорят о наличии спин-флоп-перехода.

Влияние спин-флоп-перехода можно наглядно увидеть на рис. 9, где схематично представлено направление магнитных моментов M_1 и M_2 для первой и второй пленок магнитной структуры соответственно при разных значениях параметра одноионной анизотропии $A = 0$ и $A = 13.2 \cdot 10^{-14}$ эрг. С увеличением значения поля видно, как происходит переориентация намагниченностей пленок. При нулевом и малом положительном значениях магнитного поля при параметре одноионной анизотропии $A = 13.2 \cdot 10^{-14}$ эрг происходят флуктуации намагниченности пленки, что показано пунктирными стрелками на рис. 9c,d. Данный эффект обусловлен конкуренцией двух типов анизотропии.

Рассмотрим теперь температурное поведение составляющих намагниченности M_{xy} в плоскости пленки и M_z , перпендикулярной плоскости пленки, для структур с различными толщинами ферромагнитных пленок при температурах близких к критической температуре. Результаты численного моделирования намагниченности представлены на рис. 10, 11. На рис. 10 видно, что намагниченность пленки при $A = 0$ ориентируется в плоскости XY .

Таким образом, можно видеть, что с увеличением толщины пленок структуры и, соответственно, с уменьшением параметра анизотропии типа «легкая плоскость» происходит смещение области температурного спада составляющей намагниченности M_{xy} в область все более высоких температур. При этом составляющая намагниченности M_z принимает

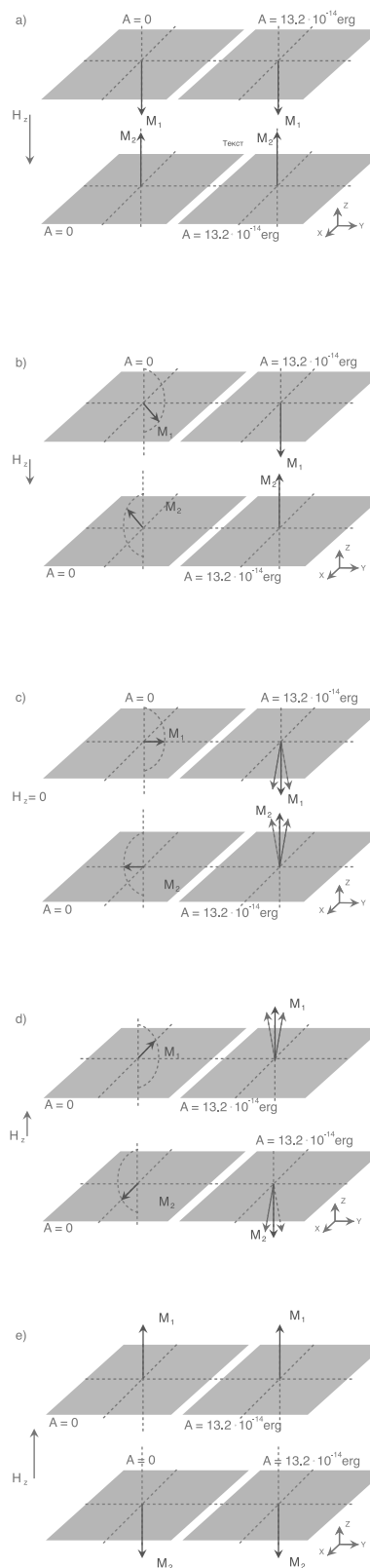


Рис. 9. Процесс переориентации магнитных моментов M_1 и M_2 пленок при изменении поля H_z для разных значений параметра одноионной анизотропии $A = 0$ и $A = 13.2 \cdot 10^{-14}$ эрг

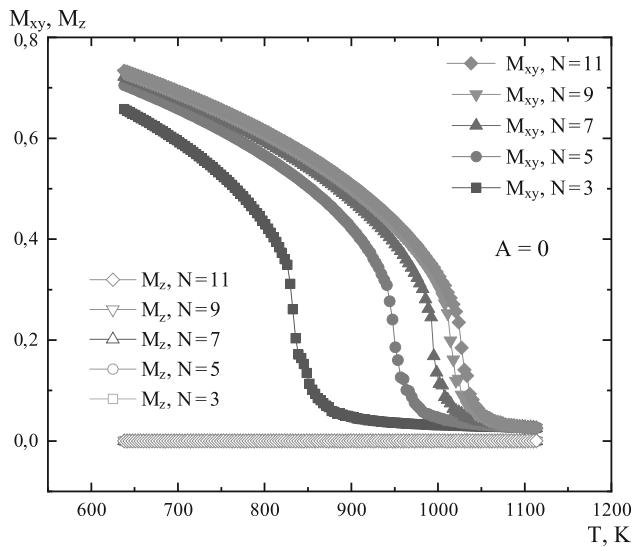


Рис. 10. Температурная зависимость намагниченности M_{xy} и M_z одной пленки для параметра одноионной анизотропии $A = 0$ с разным числом слоев пленки

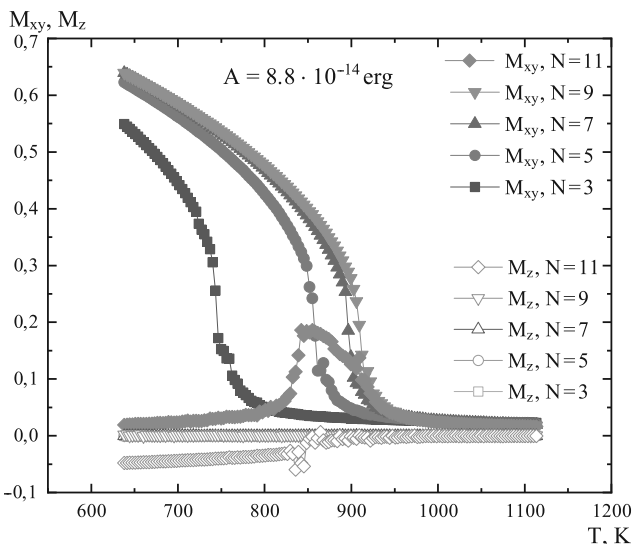


Рис. 11. Температурная зависимость намагниченности M_{xy} и M_z одной пленки для параметра одноионной анизотропии $A = 8.8 \cdot 10^{-14}$ эрг с разным числом слоев

ет исключительно малые значения, указывающие на ориентацию вектора намагниченности в плоскости пленки. Однако при большом значении параметра одноионной анизотропии $A = 8.8 \cdot 10^{-14}$ эрг и при малом значении параметра анизотропии типа «легкая плоскость» для структуры с толщиной пленок $N = 11$ ML наблюдается необычный эффект. Так, составляющая намагниченности M_{xy} , характеризующаяся высокой температурой магнитного упорядочения с $T_c(N = 11) \approx 970$ K, демонстрирует с понижением температуры увеличение намагниченности, но гораздо более слабое, чем для пленок с $N < 11$ ML, а затем при достижении температуры

$T \approx 840$ K наблюдается достаточно быстрый температурный спад намагниченности M_{xy} с последующим стремлением к нулю. В то же время, для составляющей намагниченности M_z при температурах $T < 840$ K наблюдается слабый рост с понижением температуры. Данные явления обусловлены конкуренцией двух типов анизотропии, когда эффекты влияния анизотропии типа «легкая плоскость» немного ослабевают, но все равно оказывают большее влияние на магнитные свойства структуры, чем эффекты одноионной анизотропии.

В данном случае были исследованы эффекты конкуренции анизотропии в температурной области вблизи T_c . На рис. 10 при $A = 0$ и $N = 5$ ML видим, что намагниченность лежит в плоскости XY, а ее спад происходит при $T \approx 960$ K, что хорошо согласуется со значением $T_c = 962$ K, которое было найдено ранее (рис. 4). В данном случае происходит фазовый переход второго рода из ферромагнитной фазы в парамагнитную. При рассмотрении $A = 8.8 \cdot 10^{-14}$ эрг для $N = 5$ ML спад намагниченности наблюдается при $T \approx 870$ K, что тоже согласуется с полученным ранее значением для $T_c = 874$ K.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе было проведено численное моделирование мультислойной магнитной структуры методами Монте-Карло. Для учета влияния анизотропии на магнитные свойства мультислойной структуры Co/Cu/Co была использована методика на основе анизотропной модели Гейзенберга. Был проведен расчет значений критической температуры для различных значений параметра одноионной анизотропии: $T_c(A = 0) = 962$ K, $T_c(A = 4.4 \cdot 10^{-14}$ эрг) = 918 K и $T_c(A = 8.8 \cdot 10^{-14}$ эрг) = 874 K.

При исследовании гистерезисных эффектов в низкотемпературной области при $T = 255.2$ K было выявлено изменение значения поля переключения и скорости выхода намагниченности на насыщение. При увеличении параметра одноионной анизотропии до $A = 17.6 \cdot 10^{-14}$ эрг перемагничивание пленки вдоль плоскости происходит быстрее — намагниченности становится выгоднее ориентироваться вдоль оси. Выявленное поведение объясняется наличием спин-флоп-перехода [16], который обычно наблюдается в антиферромагнетиках. Спин-флоп-переход связан с переориентацией намагниченности ферромагнитных пленок вдали от T_c и позволяет объяснить высокую восприимчивость мультислойных структур. Важной особенностью является то,

что спин-флоп-переход наблюдается в синтетической антиферромагнитной гетероструктуре [13].

При рассмотрении температурной зависимости намагниченности в области критических температур $T \approx 750\text{--}950\text{ К}$ были выявлены эффекты конкуренции совместного влияния двух типов анизотропии — анизотропии типа «легкая плоскость» и одноионной анизотропии. Исходя из полученных результатов, можно заметить, что с увеличением параметра одноионной анизотропии и с увеличением толщины пленки (и, соответственно, с уменьшением параметра анизотропии типа «легкая плоскость») влияние одноионной анизотропии становится значительнее, однако даже при больших толщинах пленок, таких как $N = 11\text{ ML}$, анизотропия типа «легкая плоскость» оказывает на исследуемую структуру преимущественное влияние. Это обусловлено тем, что анизотропия типа «легкая плоскость» проявляется в магнитной системе через эффекты спин-спиновой корреляции, которые в критической области становятся дальнедействующими, а параметр анизотропии перенормируется, давая вклад в амплитуду взаимодействия критических спиновых флуктуаций. В то же время, эффекты одноионной анизотропии являются локальными и сказываются прежде всего на изменении температуры фазового перехода в магнитоупорядоченное состояние. Чтобы намагниченности стало выгодно ориентироваться вдоль оси z , необходимо задавать очень большие значения параметра одноионной анизотропии. Экспериментально такие эффекты можно наблюдать в искусственных, специально созданных структурах [17, 18].

Финансирование. Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (проект 23-22-00093).

ЛИТЕРАТУРА

1. G. Mihajlović, N. Smith, T. Santos, J. Li, B. D. Terzis, and J. A. Katine, *Appl. Phys. Lett.* **117**, 242404 (2020).
2. R. B. Morgunov, G. L. L'vova, A. D. Talantsev, O. V. Koplak, T. Fache, and S. Mangin, *J. Magn. Magn. Mater.* **459**, 33 (2018).
3. C. C. Huang, X. Zhou, and D. A. Hall, *Sci. Rep.* **7**, 45493 (2017).
4. J. Sarkar, *Sputtering Materials for VLSI and Thin Film Devices.*, Elsevier, Amsterdam (2014).
5. M. T. Johnson, P. J. H. Bloemen, F. J. A. den Broeder, and J. J. de Vries, *Rep. Prog. Phys.* **59**, 1409 (1996).
6. C. A. F. Vaz, J. A. C. Bland, and G. Lauhoff, *Rep. Prog. Phys.* **71**, 056501 (2008).
7. P. V. Prudnikov, V. V. Prudnikov, and M. A. Medvedeva, *JETP Lett.* **100**, 446 (2014).
8. A. O. Adeyeye, G. Shimon, *Magnetism of Surfaces, Interfaces, and Nanoscale Materials. Handbook of Surface Science.*, Elsevier, Amsterdam (2015).
9. B. Heinrich, T. Monchesky, and R. Urban, *J. Magn. Magn. Mater.* **236**, 339 (2001).
10. P. V. Prudnikov, V. V. Prudnikov, M. A. Menshikova, N. I. Piskunova, *J. Magn. Magn. Mater.* **387**, 77 (2015).
11. P. V. Prudnikov, V. V. Prudnikov, A. Yu. Danilova, V. O. Borzilov, and G. G. Baksheev, *EPJ Web Conf.* **185**, 11009 (2018).
12. F. Huang, M. T. Kief, G. J. Mankey, and R. F. Willis, *Phys. Rev. B.* **49**, 3962 (1994).
13. R. A. Duine, K. J. Lee, S. Parkin, and M. D. Stiles, *Nat. Phys.* **14**, 217 (2018).
14. V. V. Prudnikov, P. V. Prudnikov, M. V. Mamonova, M. M. Firstova, and A. A. Samoshilova, *J. Phys. Commun.* **3**, 015002 (2019).
15. M. Pajda, J. Kudrnovsky, I. Turek, V. Drchal, and P. Bruno, *Phys. Rev. B.* **64**, 174402 (2001).
16. T. Tanuma, S. Takahashi, M. Kume, and K. Kuroki, *J. Magn. Soc. Jpn.* **18**, S1 (1994).
17. Y. Chen, M. Kadic, and M. Wegener, *Nat. Commun.* **12**, 3278 (2021).
18. A. Fernández-Pacheco, R. Streubel, O. Fruchart, R. Hertel, P. Fischer, and R. P. Cowburn, *Nat. Commun.* **8**, 15756 (2017).

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ЧАСОВОЙ МОДЕЛИ С ЧИСЛОМ СОСТОЯНИЙ СПИНА $q = 5$ НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ

А. К. Муртазаев, М. К. Бадиев*, М. А. Магомедов, М. К. Рамазанов

*Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра
Российской академии наук
367003, Матачкала, Россия*

Поступила в редакцию 12 мая 2023 г.,
после переработки 26 июня 2023 г.
Принята к публикации 29 июня 2023 г.

С помощью алгоритма Ванга – Ландау метода Монте-Карло проведены исследования фазовых переходов и термодинамических свойств часовой модели с числом состояний спина $q = 5$ на треугольной решетке. С использованием гистограммного метода и метода кумулянтов Биндера четвертого порядка проведен анализ фазовых переходов. Показано, что в ферромагнитной часовой модели наблюдаются два фазовых перехода типа Березинского – Костерлица – Таулеса, а в антиферромагнитной часовой модели обнаружен фазовый переход второго рода.

DOI: 10.31857/S0044451023110093

EDN: PJUZJA

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование фазовых переходов (ФП), магнитных, термодинамических и критических свойств в магнитных спиновых системах представляет большой теоретический и экспериментальный интерес. Это связано с тем, что для большинства реальных магнитных спиновых систем характерны возмущения различной природы, такие как анизотропия, взаимодействия следующих за ближайшими соседями, внешнее магнитное поле, тепловые и квантовые флуктуации, немагнитные примеси, дефекты, деформации и др. Присутствие этих факторов может повлиять на природу ФП и термодинамические характеристики таких систем [1–7]. Для изучения особенностей термодинамического поведения и природы ФП успешно используются различные решеточные модели. На их основе получено большое количество интересных результатов. Решеточные спиновые модели позволяют описать целый ряд реальных магнитных материалов.

Одной из моделей, применяемых для описания физических систем, является часовая модель с чис-

лом состояний спина q . Нами в данном исследовании рассматривается часовая модель с числом состояний спина $q = 5$ на треугольной решетке. Магнитные материалы на треугольной решетке представляют особый интерес для исследователей. Антиферромагнетики на треугольной решетке представляют собой геометрически фрустрированные спиновые системы, которые исследуются уже давно. Для фрустрированных систем существует совсем немного надежно установленных фактов. Большинство имеющихся результатов получены для модели Изинга, Гейзенберга и Поттса с числом состояний спина $q = 2, 3$ и 4 [8–14].

Многие физические свойства часовой модели зависят от значения q . В случае, когда $q = 2, 3, 4$, эта модель имеет точное решение. Часовая модель сводится к модели Изинга и Z3-модели Поттса при $q = 2, 3$ соответственно. При $q = 4$ данная модель эквивалентна двум копиям модели Изинга. Установлено, что для этих трех случаев в системе наблюдается ФП второго рода из высокотемпературной парамагнитной фазы в низкотемпературную ферромагнитную упорядоченную фазу.

Когда $q \rightarrow \infty$ данная модель сводится к стандартной XY-модели. В этом случае спонтанного нарушения симметрии не наблюдается, но происходит ФП из низкотемпературной фазы Березинского – Костерлица – Таулеса (БКТ) в высокотемпературную парамагнитную фазу. Для часовой модели

* E-mail: m_zagir@mail.ru

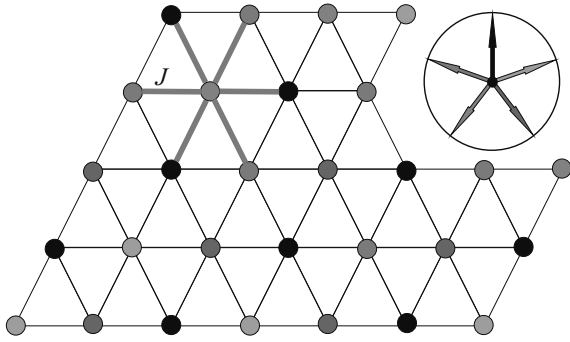


Рис. 1. Схематическое представление часовой модели с $q = 5$

с числом состояний спина $q = 5$ имеется очень мало точно установленных фактов. К настоящему моменту остается открытым вопрос о роде ФП при значении $q = 5$.

Для получения ответа на этот вопрос в данной работе нами проводится исследование двумерной часовой модели на треугольной решетке с $q = 5$. Исследование этой модели с антиферромагнитными обменными взаимодействиями на треугольной решетке в литературе практически не встречается. Антиферромагнитное обменное взаимодействие в данной модели может привести к фрустрации, вырождению основного состояния, появлению различных фаз и ФП, а также влиять на его термодинамические, магнитные и критические свойства. В связи с этим в данной работе нами предпринята попытка провести исследование ФП и термодинамических свойств этой модели на треугольной решетке.

Исследования проводятся на основе современных методов и идей, что позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с природой ФП и термодинамическим поведением фрустрированных спиновых систем.

2. МОДЕЛЬ И МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЙ

Гамильтониан для часовой модели с q -состояниями, которая представляет собой дискретизированную спиновую xy -модель, можно записать в следующем виде:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j), \quad (1)$$

где спиновые состояния q в узле i обозначены плоским углом $\theta_i = 2\pi k_i/q$, $k_i = 1, \dots, q$. В данном исследовании нами рассматриваются два случая. В первом случае $J > 0$ — параметр ферромагнитного обменного взаимодействия, а во втором случае $J < 0$

— параметр антиферромагнитного обменного взаимодействия.

В последние десятилетия часовая модель с q -состоянием широко исследовалась как аналитически [15–20], так и численно [21–25]. Тем не менее, до сих пор неясна природа ФП для малых q , таких как $q = 5, 6$. При значении $q = 2$ эта модель сводится к классической модели Изинга со спиновой симметрией вверх-вниз, а в предельном случае, при $q \rightarrow \infty$ — xy -модели, где ориентации спинов непрерывны внутри плоскости. В случае двумерной xy -модели ($q \rightarrow \infty$) не существует дальнеупорядоченной фазы при конечных температурах, как утверждает теорема Мермина–Вагнера [26]. Вместо этого система претерпевает БКТ-переход бесконечного порядка из парамагнитной фазы в БКТ-фазу.

В данном исследовании нами рассматривается часовая модель при $q = 5$. Схематическое описание этой модели представлено на рис. 1. На вставке приведены направления для каждого из пяти состояний спина и соответствующее цветовое представление. Как видно на рисунке, у каждого спина есть шесть (линии красного цвета) соседей. Спины, обозначенные кружками одного и того же цвета, имеют одинаковое направление.

Решеточные магнитные модели на основе микроскопических гамильтонианов успешно изучаются на основе методов Монте-Карло (МК) [27–32]. В последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов для исследования подобных систем. Одним из наиболее эффективных для исследования подобных систем является алгоритм Ванга–Ландау [33], особенно в низкотемпературной области.

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

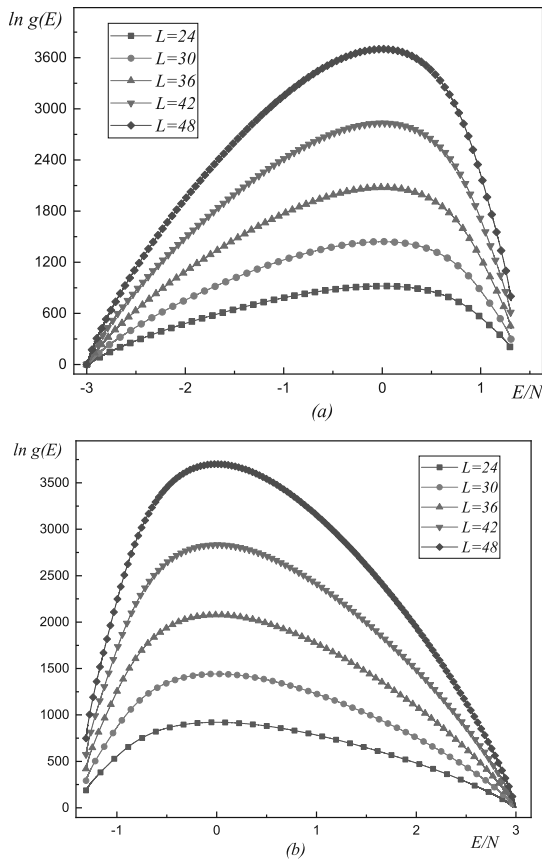


Рис. 2. Плотность состояний $g(E)$ при различных линейных размерах L : для ферромагнитной модели (a) и для антиферромагнитной модели (b)

Для анализа природы и характера ФП использовался гистограммный метод анализа данных и метод кумулянтов Биндера четвертого порядка. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями и линейными размерами $L \times L = N$, $L = 24 - 120$, где L — линейный размер решетки, N — количество спинов в системе.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Алгоритм Ванга–Ландау является эффективным методом для расчета плотности состояния энергии. Преимущество алгоритма заключается в том, что плотность состояний $g(E)$ в системе не зависит от температуры. Зная плотность состояний системы, можно рассчитать температурную зависимость любого интересующего нас термодинамического параметра. На рис. 2 приведены плотности состояний $g(E)$ для разных линейных размеров системы для ферромагнитной и антиферромагнитной

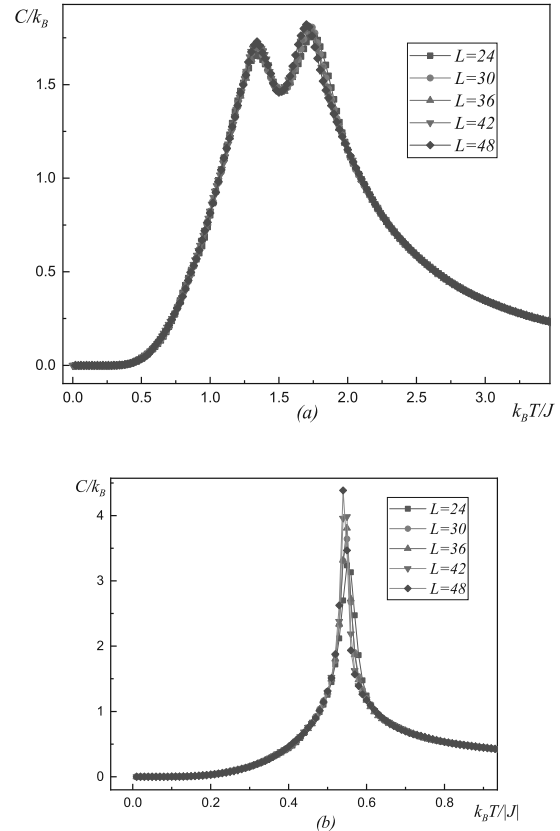


Рис. 3. Зависимость теплоемкости C/k_B от температуры $k_B T/|J|$ для разных L : для ферромагнитной модели (a) и для антиферромагнитной модели (b)

моделей (здесь и далее статистическая погрешность не превышает размеров символов, использованных для построения зависимостей). Как видно на рисунке, плотность состояний имеет куполообразную форму. С увеличением линейных размеров системы максимум плотности состояний $g(E)$ значительно возрастает.

На рис.3. представлены характерные зависимости теплоемкости C от температуры для ферромагнитной и антиферромагнитной моделей с различными линейными размерами системы L . Отметим, что для ферромагнитной модели (рис.3 a) на зависимостях теплоемкости C от температуры для всех систем вблизи критической температуры наблюдаются два хорошо выраженных максимума. Наличие двух максимумов на температурной зависимости теплоемкости позволяет говорить о двух последовательных ФП в данной модели.

Аналогичный результат был получен в работах [15, 19, 34], где была исследована ферромагнитная часовая модель с $q = 5$ на квадратной и тре-

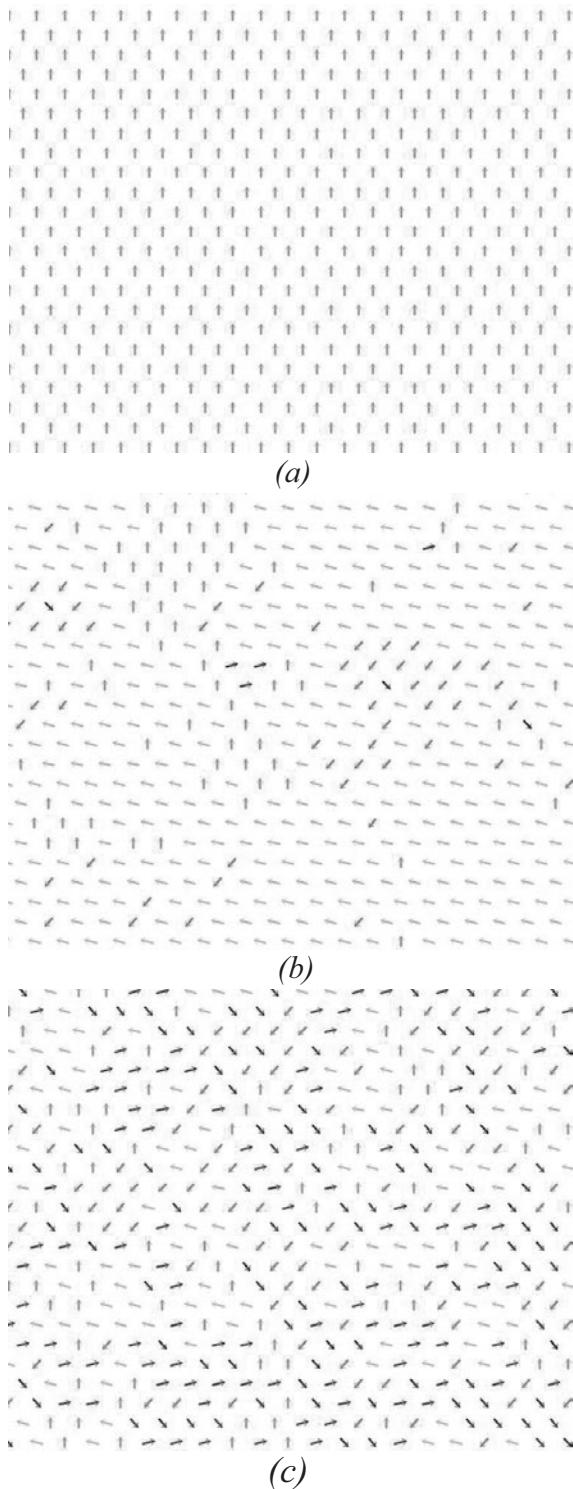


Рис. 4. Магнитные структуры основного состояния для ферромагнитной модели: *a* — в интервале температур $0 \leq T < T_{c1}$; *b* — в интервале температур $T_{c1} < T < T_{c2}$; *c* — $T > T_{c2}$

угольной решетках. Для антиферромагнитной мо-

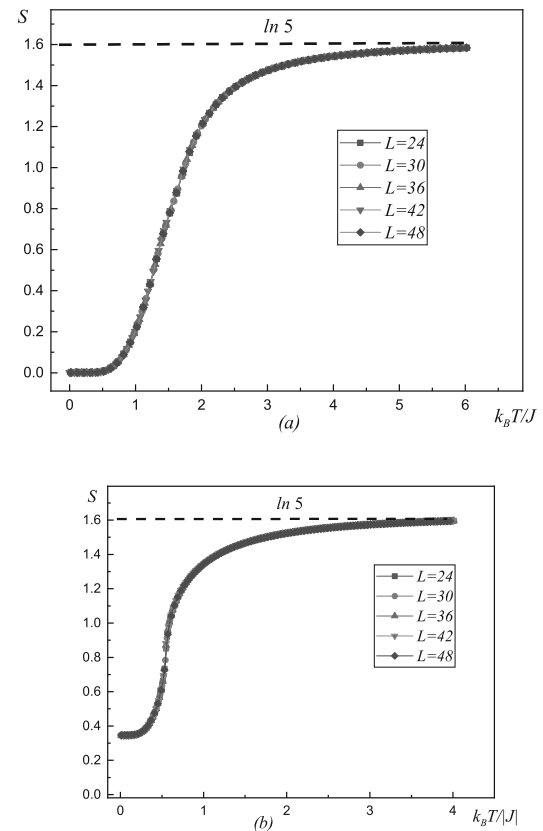


Рис. 5. Температурные зависимости энтропии S : для ферромагнитной модели (*a*) и для антиферромагнитной модели (*b*)

дели (рис.3 *b*) наблюдается только один максимум, что позволяет говорить об одном ФП. Все максимумы увеличиваются с ростом числа спинов в системе, причем они в пределах погрешности приходятся на одну и ту же температуру даже для систем с наименьшим значением L . Это свидетельствует, во-первых, о высокой эффективности использованного способа добавления периодических граничных условий, а во-вторых, о достижении насыщения по N для многих исследуемых нами параметров.

Для определения типа упорядочения нами проведен анализ магнитных структур основного состояния в широком температурном интервале. На рис. 4 приведены полученные нами структуры. На рисунке видно, что в данной модели наблюдаются три типа магнитного упорядочения: в интервале температур $\theta \leq T < T_{c1}$ (рис. 4 *a*) наблюдается полностью упорядоченная ферромагнитная фаза; в интервале $T_{c1} < T < T_{c2}$ (рис. 4 *b*) — фаза типа Березинского – Костерлица – Таулеса, где наблюдается ближний порядок в системе, в котором превалирует одно из

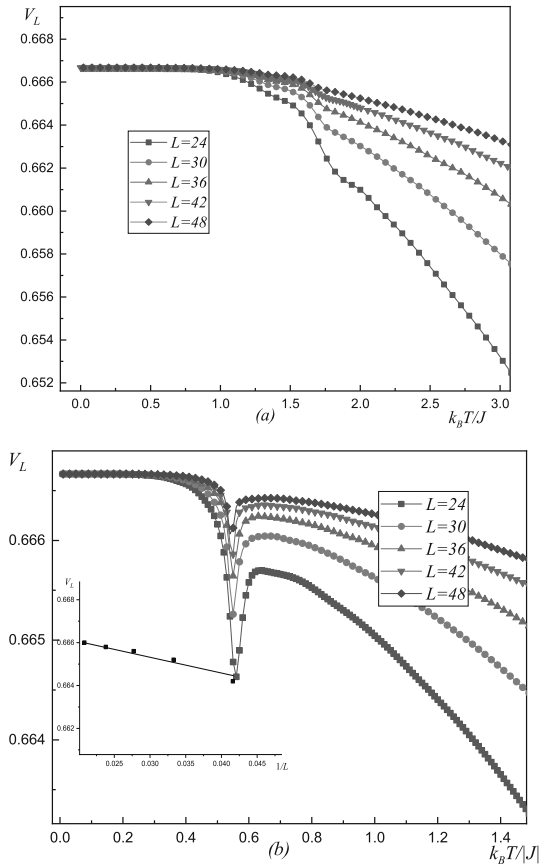


Рис. 6. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T)$: для ферромагнитной модели (a) и для антиферромагнитной модели (b)

пяти состояний спина; при дальнейшем повышении температуры $T > T_{c2}$ (рис. 4 c) — полностью разупорядоченная парамагнитная фаза.

На рис. 5 приведены температурные зависимости энтропии S для обеих моделей. На рисунках видно, что с увеличением температуры энтропия для всех систем стремится к теоретически предсказанному значению $\ln 5$. При низких температурах, близких к абсолютному нулю, для ферромагнитной модели энтропия стремится к нулевому значению для всех значений L . Нулевая остаточная энтропия свидетельствует об отсутствии вырождения основного состояния. Для антиферромагнитной модели энтропия при низких температурах стремится к ненулевому значению для всех значений L . Такое поведение свидетельствует о сильном вырождении данной модели, что характерно для фрустрированных систем.

Для анализа характера ФП использовался метод кумулянтов Биндера четвертого порядка по энергии, который имеет следующий вид [35]:

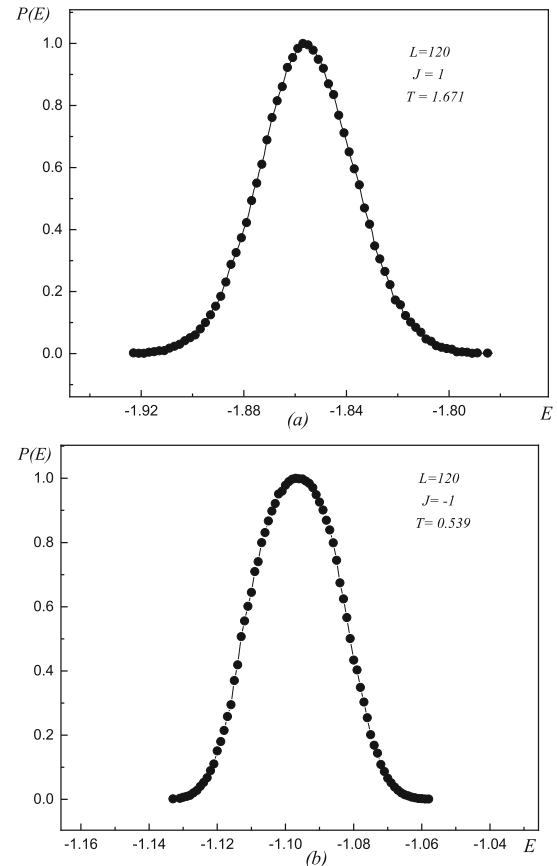


Рис. 7. Гистограмма распределения энергии: для ферромагнитной модели (a) и для антиферромагнитной модели (b)

$$V_L(T) = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle}{3\langle E^2 \rangle_L^2}. \quad (2)$$

Известно, что ФП второго рода характеризуются следующими отличительными особенностями [36]: усредненная величина $V_L(T)$ стремится к тривиальному значению согласно выражению $V_L(T) = V^* + bL^{-d}$ при $L \rightarrow \infty$ и $T = T(L)$, где $V^* = 2/3$.

Характерные зависимости кумулянтов Биндера $V_L(T)$ от температуры для систем с линейными размерами для ферромагнитной и антиферромагнитной моделей приведены на рис. 6. Как видим на рисунках, энергетические кумулянты для обеих моделей показывают разный характер поведения. Для антиферромагнитного случая на графиках зависимости энергетических кумулянтов наблюдаются минимумы в области температуры фазового перехода, которые уменьшаются с увеличением размеров системы L . Для ферромагнитной модели такие минимумы не наблюдаются. Заметим, что на вставке к рис. 6 b на-

глядно видно, что тривиальная величина $V^* \rightarrow 2/3$ при $L \rightarrow \infty$. Такое поведение, как отмечалось выше, характерно для ФП второго рода.

Для более точного определения рода ФП мы использовали гистограммный анализ данных метода МК. В случае ФП первого рода на гистограмме распределения энергии вблизи температуры перехода наблюдается бимодальное распределение энергии. Таким образом, на графике появляются два максимума, расположенных симметрично относительно равновесного значения энергии. В случае ФП второго рода должен наблюдаться один максимум. На рис. 7 *a, b* представлены гистограммы распределения энергии для линейных размеров системы $L = 120$ в области температуры ФП для ферромагнитной и антиферромагнитной моделей.

На графиках зависимости вероятности P от энергии системы E наблюдается один хорошо выраженный максимум, который свидетельствует о наличии в антиферромагнитной модели ФП второго рода. Для ферромагнитной часовой модели подобный анализ показывает наличие одного максимума, который позволяет нам утверждать, что в данной модели точно не наблюдается ФП первого рода. Такое поведение характерно для ФП второго рода. Однако анализ магнитных структур основного состояния свидетельствует в пользу перехода типа Березинского – Костерлица – Таулеса (рис.4.).

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено исследование фазовых переходов и термодинамических свойств двумерной часовой модели на треугольной решетке с числом состояний спина $q = 5$ с использованием алгоритма Ванга – Ландау метода Монте-Карло. Анализ полученных данных показывает, что для ферромагнитной часовой модели на температурной зависимости теплоемкости наблюдаются два максимума. На основе метода кумулянтов Биндера и гистограммного метода проведен анализ рода ФП данной модели. Обнаружено, что для ферромагнитной часовой модели происходят два фазовых перехода типа Березинского – Костерлица – Таулеса. Данные, полученные для антиферромагнитной часовой модели, свидетельствуют о том, что основное состояние системы сильно вырождено и в системе происходит ФП второго рода. Показано, что антиферромагнитное обменное взаимодействие ближайших соседей может повлиять на физические свойства часовой модели с $q = 5$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Е. Свистов, Л. А. Прозорова, Н. Бюттген и др., Письма в ЖЭТФ **81**, 133 (2005).
2. С. Е. Коршунов, УФН **176**, 233 (2006).
3. M. Tisser, B. Delamotte, D. Mouhanna, Phys. Rev. Lett. **84**, 5208 (2000).
4. P. Calabrese, P. Parruccini, A. Pelissetto et al., Phys. Rev. B **70**, 174439-1 (2004).
5. М. К. Бадиев, А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов и др., ЖЭТФ **161**, 753 (2022).
6. A. I. Smirnov, H. Yashiro, S. Kimura et al., Phys. Rev. B **75**, 134412 (2007).
7. J. L. Jacobsen, J. Salas, C. R. Scullard, J. Phys. A: Math. Theor. **50**, 345002 (2017).
8. E. Z. Ising, Phys. **31**, 253 (1924).
9. G. H. Wannier, Phys. Rev. **79**, 357 (1950).
10. M. Tisser, B. Delamotte, and D. Mouhanna. Phys. Rev. Lett. **84**, 5208 (2000).
11. A. K. Murtazaev, M. K. Badiev, M. K. Ramazanov et al., Phase Transitions **94**, 394 (2021).
12. F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235,(1982); Errata, Rev. Mod. Phys. **55**, 315 (1983).
13. M. Nauenberg, and D. J. Scalapino, Phys. Rev. Lett. **44**, 837 (1980).
14. C. Itzykson, H. Saleur, J.-B. Zuber, *Conformal Invariance and Applications to Statistical Mechanics*, World Scientific, Singapore (1988).
15. E. Rastellia, S. Reginaa, and A. Tassi, J. Magn. Magn. Mater. **272**, 997 (2004).
16. S. S. Murty, Challa, and D. P. Landau, Phys. Rev. B **33**, 437 (1986).
17. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
18. Li Guanrong, H. P. Kwok, G. Zheng-Cheng, arXiv:2009.10695v1 [cond-mat.stat-mech] 22 Sep 2020.
19. Li Zi-Qian, Li-Ping Yang, Z. Y. Xie et al., Phys. Rev. E **101**, 060105R, (2020).

20. G. Ortiz, E. Cobanera, and Z. Nussinov, Nucl. Phys. B **854**, 780 (2012).
21. Y. Kumano, K. Hukushima, Y. Tomita et al., Phys. Rev. B **88**, 104427 (2013).
22. O.A. Negrete, P. Vargas, F. J. Pena et al., Entropy **20**, 933 (2018).
23. S. Chatterjee, S. Puri, and R. Paul, Phys. Rev. E **98**, 032109 (2018).
24. T. Surungan, S. Masuda, Y. Komura et al., J. Phys. A **52**, 275002 (2019).
25. C. O. Hwang, Phys. Rev. E **80**, 042103 (2009).
26. N.D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133–6 (1966).
27. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Мазагаева и др., ЖЭТФ **156**, 502 (2019).
28. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, М. А. Магомедов, ЖЭТФ **161**, 816 (2022).
29. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, Письма в ЖЭТФ **109**, 610 (2019).
30. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, М. А. Магомедов и др., Письма в ЖЭТФ **114**, 762 (2021).
31. A. K. Murtazaev, M. K. Badiev, M. K. Ramazanov et al., Physica A **555**, 124530 (2020).
32. R. Masrour, A. Jabar, A. Benyoussef et al., J. Magn. Magn. Mater. **401**, 695 (2016).
33. F. Wang, and D. P. Landau, Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).
34. Y. Chen, Z. Y. Xie, and J. F. Yu, Chin. Phys. B **27**, 080503 (2018).
35. K. Eichhorn and K. Binder, J. Phys.: Cond. Matt. **8**, 5209 (1996).
36. D. Loison and K. D. Schotte, Eur. Phys. J. B **5**, 735 (1998).

МОДЕЛЬ СПИНОВОГО СТЕКЛА ДЛЯ КВАНТОВЫХ ЯМ GaAs/AlGaAs, ЛЕГИРОВАННЫХ НЕМАГНИТНЫМИ ПРИМЕСЯМИ, ВБЛИЗИ ПЕРЕХОДА МЕТАЛЛ–ИЗОЛЯТОР

Н. В. Агринская*, В. И. Козуб

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук
194021, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 6 апреля 2023 г.,
после переработки 23 мая 2023 г.
Принята к публикации 25 мая 2023 г.

В предыдущей работе мы представили эксперименты, которые предполагали, что может наблюдаться ферромагнитное упорядочивание спинов локализованных дырок в квантовых ямах GaAs/AlGaAs при легировании мелкими акцепторами (Be) в концентрации, близкой к переходу металл–изолятор. Компенсирующая примесь (Si) вводилась в узкую область в центре барьеров [А. В. Шумилин, В. И. Козуб, Н. В. Агринская, Н. Ю. Михайлин, Д. В. Шамшур, ЖЭТФ **159**, 915 (2021)]. В этой работе мы представляем результаты магнитотранспортных экспериментов, выполненных на аналогичных структурах без компенсирующей примеси (Si). В данных образцах степень компенсации контролируется фоновыми примесями, расположенными на краях квантовых ям и в барьерах. При низких температурах, $T \leq 10$ К, мы наблюдали изотропное, линейное магнитосопротивление, аномальное поведение эффекта Холла в зависимости от магнитного поля, а также медленные релаксации сопротивления после приложения магнитного поля. Мы объясняем такой аномальный магнитотранспорт как проявление ферромагнитного перехода или спинового стекла, возникающего вследствие непрямого спинового обмена между дырками, локализованными на примесях, вблизи перехода металл–изолятор. Однако совершенный беспорядок, включающий знаки интерспиновых взаимодействий, приводит к нестабильным конфигурациям. Далее мы представляем модель, в которой, стартуя с совершенного беспорядка, мы предлагаем метод получения стабильной конфигурации. Показано, что результирующая спиновая структура, «плотно упакованная» структура «кластеров», способна объяснить особенности, наблюдающиеся в эксперименте, в частности изотропное линейное магнитосопротивление.

DOI: 10.31857/S004445102311010X
EDN: PKCREZ

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследования, направленные на создание систем, обладающих одновременно полупроводниковыми и магнитными свойствами, продолжают в течение длительного времени. Обычно это достигается введением магнитных примесей, таких как Mn, в структуры GaAs [1]. Тем не менее даже без магнитных примесей полупроводники содержат нескомпенсированные спины, поскольку у электрона, локализованного на доноре или у дырки, локализованной на акцепторе, есть спин $1/2$. В работе [2] было показано, что обобщенная разупорядоченная модель

Хаббарда может давать ферромагнитное основное состояние при концентрации примеси меньше чем N_c для перехода металл–изолятор (МИ), по крайней мере для нанометровых масштабов. Такой ферромагнетизм оказывается невозможным для объемных систем, но достижим в квантовых точках и 2D-гетероструктурах. Если бы он наблюдался, это была бы первая экспериментальная реализация ферромагнетизма этого типа. Однако, насколько нам известно, такое ферромагнитное основное состояние не наблюдалось ни в каких типах материалов.

В том случае, если концентрация легирующей примеси N и длина локализации a достаточно велики ($N > N_c \simeq 0.15/a^2 \simeq 3 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ для примеси Be [3]), примесные состояния сливаются с краем зоны проводимости или валентной зоны и локализованные электроны в системе, фактически, исчезают,

* E-mail: nina.agrins@mail.ioffe.ru

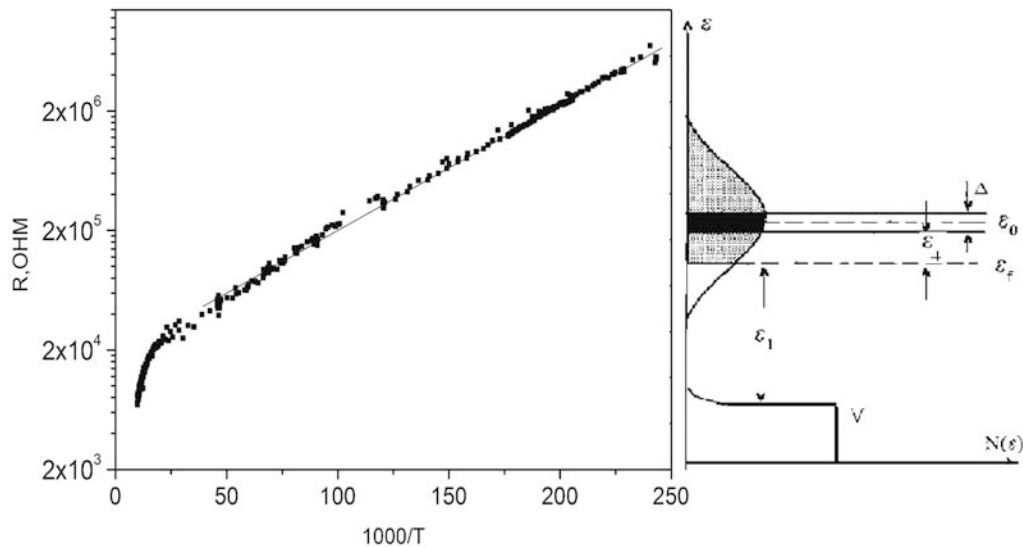


Рис. 1. Температурная зависимость сопротивления, вставка — структура примесной зоны (зависимость плотности состояний N от энергии дырок ε)

происходит переход металл–изолятор (МИ). В противоположном случае малого легирования, $N < N_c$, локализованные электроны связаны антиферромагнитным взаимодействием, экспоненциально убывающим на расстояниях порядка a . Тем не менее не существует однозначных предсказаний, каким будет магнитное состояние электронов на примесях вблизи перехода металл–диэлектрик ($N \leq N_c$). Строгой теории для этого случая не существует, и особый интерес представляют экспериментальные исследования.

В предыдущей работе были приведены эксперименты, которые предполагают, что ферромагнитное упорядочивание спинов локализованных дырок в квантовых ямах GaAs/AlGaAs возможно наблюдать при легировании мелкими акцепторными примесями (Be) в концентрации близкой к переходу МИ. Компенсирующая примесь (Si) вводилась в узкую область центра барьеров [4]. В настоящей работе мы представляем результаты магнитотранспортных экспериментов, выполненных на аналогичных структурах, но без компенсирующей примеси (Si). Это означает, что данное поведение скорее связано не со способом компенсации, а с концентрацией Be, $N \sim N_c$. Мы объясняем аномальный магнитотранспорт проявлением ферромагнитного перехода или спинового стекла, возникающего вследствие непрямого спинового обмена между дырками, локализованными на примесях вблизи перехода МИ [4]. В данной работе мы также представили модель, в которой результирующая спиновая структура представляет собой плотно упакованную систему кластеров. Эта модель оказалась способна воспроизвести

особенности, наблюдаемые в эксперименте, в частности изотропное линейное магнитосопротивление.

2. ЭКСПЕРИМЕНТ

В нашей предыдущей работе [4] мы сообщали об экспериментах, выполненных на легированных бериллием квантовых ямах GaAs/AlGaAs. Центры ям (5 нм от 15 нм) были легированы акцепторами (Be), в то время как компенсирующая примесь (Si) вводилась в узкую область центра барьеров (25 нм).

В настоящей статье мы представляем результаты магнитотранспортных экспериментов, выполненных на аналогичных структурах, при этом компенсация осуществлялась фоновыми дефектами, расположенными на краях квантовых ям и внутри барьеров. Степень компенсации K была мала, $K = N_D/N_A < 0.01$. Концентрация акцепторной примеси в ямах составляла приблизительно $N_A \sim 10^{12} \text{ см}^{-2}$, что в 2–3 раза меньше критерия Мотта N_c .

Температурная зависимость сопротивления показана на рис. 1. Для температур ниже 20 К сопротивление следует закону Аррениуса с аномально низкой энергией активации $\epsilon_4 \simeq (2\text{--}3) \text{ мэВ}$. Это связано с активацией носителей с уровня Ферми в зону делокализованных состояний в центральной части примесной зоны Δ , показанной на рис. 1. При температуре ниже 4 К и токах 1–10 нА, наблюдался пробы, типичный для систем с виртуальным переходом Андерсона [5]. Мы обнаружили, что результаты для двух различных типов образцов (с легированием Si и без) аналогичны, что показывает универсальность

модели виртуального перехода Андерсона для d -ных легированных систем с низкой степенью компенсации.

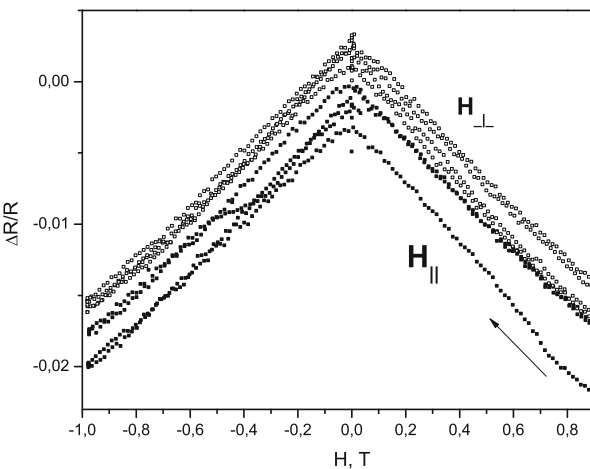


Рис. 2. Магнитосопротивление, измеренное при 4.2 К, двух направлений магнитного поля: параллельно и перпендикулярно поверхности. Стрелка показывает направление изменения магнитного поля

Магнитосопротивление при низких температурах ($T \leq 10$ К) в достаточно сильных магнитных полях, $H \geq 2$ Тл, было положительным и сильно анизотропным, что является типичным для 2D-структур с квантовыми ямами. Магнитосопротивление в более слабых полях (см. рис. 2) оказалось изотропным, отрицательным и строго линейным в зависимости от поля. Такое поведение аналогично описанному в работе [6]. Отрицательное магнитосопротивление было чувствительно к температуре, возрастая при уменьшении температуры (см. рис. 3). Изотропное поведение этого магнитосопротивления в структурах может указывать на его спиновую природу.

Зависимости $R(T)$ для FC–ZFC-режимов, показанные на рис. 4, демонстрируют существенную разницу при низких температурах, что может означать наличие магнитного взаимодействия в образце. В случае ZFC образец охлаждался от 50 К до 4 К в нулевом магнитном поле, далее было приложено магнитное поле $H \sim 0.5$ Тл, и сопротивление измерялось при увеличении температуры.

Рисунок 5 показывает anomalous поведение эффекта Холла: при температурах $T \leq 10$ К и полях $H \leq 0.4$ Тл наклон холловского сопротивления меняет знак, затем достигает насыщения или противоположного наклона. Это предполагает, что anomalous компонента эффекта Холла, связанная с магнитизацией M , доминирует и даже приводит к смене

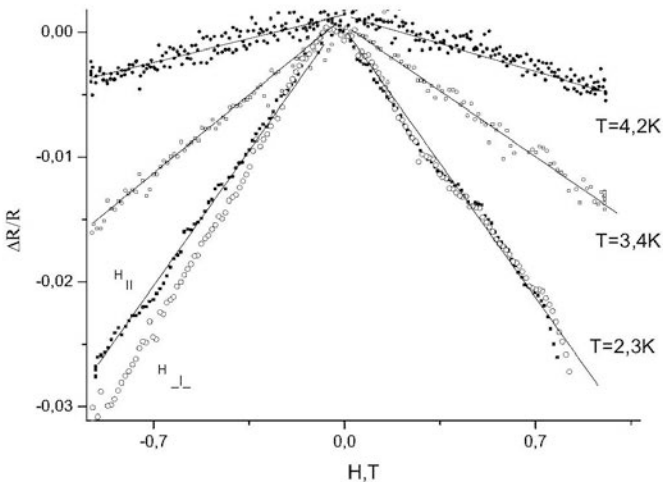


Рис. 3. Температурная зависимость магнитосопротивления при 2.3 К снята для двух направлений магнитного поля: параллельно и перпендикулярно поверхности

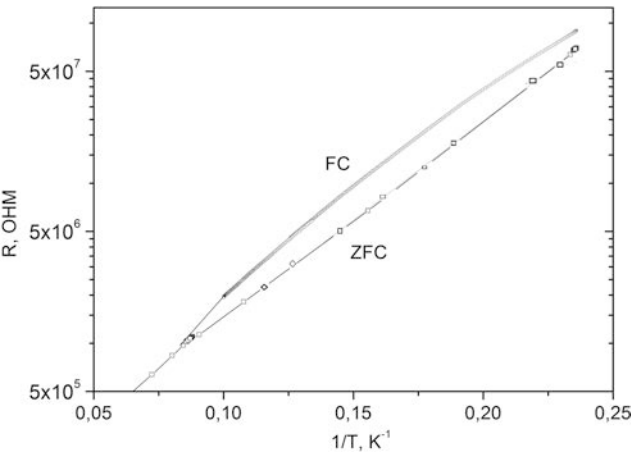


Рис. 4. Температурная зависимость сопротивления с магнитным полем (FC) и без магнитного поля (ZFC)

знака. В таких случаях вклад нормального эффекта Холла не учитывается [7]. Поэтому сопротивление образца R_H может быть выражено как $R_H \simeq R_s M$, где R_s — сопротивление образца. Похожее поведение наблюдалось раньше в пленках Ge, легированных магнитной примесью Mn [8], и описывалось вкладом anomalous эффекта Холла вследствие спонтанной магнитизации.

Мы также проводили непосредственное измерение намагниченности образцов при температуре 5 К [4]. Общий диамагнитный ход намагниченности связан со свойствами подложки. Тем не менее на его фоне явно виден вклад от дырок в квантовых ямах, у которого наблюдается гистерезис в полях меньше 0.3 Тл, связанный, вероятно, с переходом в упорядоченное спиновое состояние.

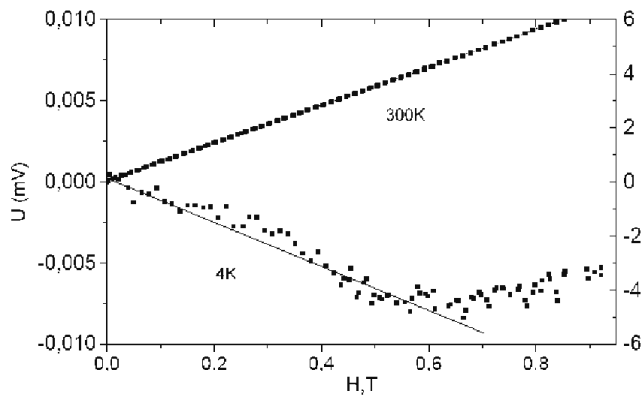


Рис. 5. Зависимость от магнитного поля холловского сопротивления для двух температур

Наши исследования предполагают, что фаза спинового стекла (SG) реализуется в обоих типах образцов. SG характеризуется присутствием магнитных моментов, распределенных хаотическим образом со сложным обменным взаимодействием с различными знаками, величинами и пространственными распределениями. Свойства, которые отличают SG от других магнитных фаз, — это отсутствие равновесия физических свойств во времени и наличие гистерезиса, при котором физические свойства зависят от магнитной и термической истории системы. На энергию беспорядка образца влияют изменения в магнитизации. Заметим, что небольшие изменения беспорядка вблизи перехода МИ могут приводить к значительным изменениям проводимости, что приводит к влиянию магнитного поля на транспортные явления, такие как магнитосопротивление.

3. ТЕОРИЯ

Вопрос о спиновой структуре легированных полупроводников остается открытым, при этом модель спинового стекла рассматривается как возможный сценарий для таких систем [9]. Однако не существует решающих доказательств, ни теоретических, ни экспериментальных, в пользу этого заключения. Кроме того, пространственный беспорядок в положении примесей может приводить к беспорядку в обменных энергиях. Однако антиферромагнитный характер межузельного обмена может приводить к хаотическому характеру локальной обменной энергии, знак будет зависеть от окружения. Тенденция к формированию стекольной структуры кажется наиболее вероятной в образцах вблизи перехода МИ, где ожидается заметное перекрытие электронных волновых функций. Наши эксперименты с образца-

ми, близкими к переходу МИ, демонстрируют сосуществование локализованных и делокализованных состояний. Примешивание непрямого обмена между локализованными спинами, который проявляет осциллирующее поведение в зависимости от межузельного расстояния, также подтверждает сценарий спинового стекла. Однако мы не уверены, что для легированных полупроводников будут воспроизводиться все детали «классического» спинового стекла и ожидаем хаотический характер обменных энергий в присутствии взаимодействий с различным знаком.

Тем не менее совершенный беспорядок, включающий знаки межузельных взаимодействий, приводит к нестабильным конфигурациям. Поэтому мы предлагаем модель, где, начиная от совершенного беспорядка, мы применяем процедуру, приводящую к стабильной конфигурации. С помощью этой модели мы показываем, что результирующая спиновая структура может воспроизвести особенности, наблюдаемые в наших экспериментах.

4. МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЕ ВСЛЕДСТВИЕ МАГНИТИЗАЦИИ КЛАСТЕРОВ

Основной идеей нашего исследования является анализ структуры локализованных спинов, связанных с акцепторами Ве, которые формируют своего рода спиновое стекло благодаря обменным взаимодействиям между спинами. В этой модели мы исследуем присутствие островов или кластеров внутри спинового стекла, которые относительно слабо связаны со своим окружением. Концепция кластеров в классическом спиновом стекле на основе модели Изинга была предложена ранее в [10]. В нашем исследовании было обнаружено, что связь кластеров с их окружением уменьшается при увеличении размера кластера m , как было отмечено в [11], в результате численной симуляции, основанной на кластерной модели.

В нашей работе представляем различные качественные оценки в рамках векторной модели (модель Гейзенберга). Наши оценки показывают, что пограничная энергия описывается выражением

$$E_b \sim \frac{tJ_0}{m}, \quad (1)$$

где J_0 — типичная обменная энергия, а параметр t для нашей модели есть численный параметр порядка единицы. Отметим, что на основе оценок данных в [11], получается $E_b \propto 1/m^{0.3}$. В то же время,

кластеры имеют некоторый флуктуирующий магнитный момент и поэтому внешнее магнитное поле приводит к ориентации этих магнитных моментов. Данный эффект контролируется с помощью конкуренции между пограничной энергией кластеров (которая возрастает с размером) и зеемановской энергией (которая уменьшается с размером). Выравнивание магнитизаций кластеров приводит к уменьшению флуктуаций межспиновой обменной энергии и, в конечном счете, к уменьшению потенциала беспорядка. Это, в свою очередь, приводит к уменьшению сопротивления. Мы можем грубо оценить среднюю магнитизацию кластера M_d как

$$M_d \sim M_0 m, \quad (2)$$

где M_0 — магнитизация, связанная с элементарным дырочным спином. Зеемановская энергия, соответственно, есть $E \sim M_d H$. Таким образом, магнитное поле может выстраивать кластеры с

$$M_d H \geq E_b \quad (3)$$

и мы получаем, что пороговая величина m связана с H как $m \propto H^{-1/2}$. Средняя концентрация выстроенных спинов оценивается как

$$\sim \frac{N_A}{m} \propto H^{1/2}, \quad (4)$$

где N_A — концентрация акцепторов.

Флуктуации обменной энергии для подвижных электронов, движущихся через рассматриваемую структуру, как ожидается, дают стандартный эффект беспорядка, приводящий, в частности, к электронной локализации. Поэтому частичное упорядочивание внутри этой системы приводит к уменьшению сопротивления образца. Чтобы оценить это, мы должны рассмотреть среднеквадратичную флуктуацию обменного потенциала U_{ex} . Согласно стандартной процедуре, она выражается как

$$(\overline{\delta U_{ex}})^2 = (\overline{U_{ex}^2} - (\overline{U_{ex}})^2), \quad (5)$$

где $\overline{U_{ex}}$ — средняя обменная энергия, связанная со средним спином, оцененным выше.

Чтобы исключить влияние магнитного поля на сопротивление, необходимо иметь в виду, что для любого механизма сопротивления оно является некой возрастающей функцией от среднеквадратичной флуктуации потенциала беспорядка $(U_d)^2$, $R = f((U_d)^2)$, хотя обменный вклад в беспорядок является добавочным к вкладу кулоновских флуктуаций при условии, что зарядовые и спиновые флуктуации некоррелированы. Итак, в линейном

приближении, считая что магнитное поле дает малый вклад в $(\overline{U_{ex}})^2$, мы имеем

$$\delta R(H) \propto -(\overline{U_{ex}})^2 \propto (-H). \quad (6)$$

На самом деле эксперимент [6] демонстрирует скейлинг сопротивления как H/T , т. е. магнитосопротивление уменьшается с ростом температуры (рис. 3). Такое поведение можно легко объяснить, если мы имеем дело со сдвигом края подвижности ε_m . Поскольку проводимость в этом случае имеет активационный характер (как реально наблюдается), она пропорциональна $\exp[-(\varepsilon_m - \mu)/T]$ (где μ — химический потенциал). Если край подвижности сдвигается, $\delta\varepsilon_m \propto (-H)$, и $\delta\varepsilon_m < T$, тогда, рассуждая в терминах малых сдвигов $\delta\varepsilon_m$, мы получим наблюдаемое поведение. Заметим, что эффективный край подвижности может быть чувствителен к большим скалкам потенциала из-за порога перколяции. Однако сдвиг края подвижности может быть меньше, чем среднеквадратичная флуктуация потенциала.

5. ГРАНИЧНАЯ ЭНЕРГИЯ КЛАСТЕРА

Чтобы определить типичную граничную энергию кластера, мы начнем с «чисто случайной» конфигурации, т. е. с хаотических некоррелированных направлений всех спинов. Естественно такая конфигурация нестабильна ниже температуры стеклования.

Чтобы увидеть это, возьмем некий блок взаимодействующих спинов (кластер), который связан с окружением. Для простоты предположим, что взаимодействие между кластером и окружением включает только спины на границе блока, которые связаны с соседними спинами в окружении. Для чисто случайной конфигурации можно ожидать, что граничная энергия (в результате связи блока с окружением) может быть отрицательной. Инверсия всех спинов внутри кластера (включая пограничные спины) не влияет на спин-спиновое связывание внутри кластера, но меняет знак связывающей энергии блока с окружением, делая его положительным. Поэтому, если по каким-то причинам блок и окружение стабильны (или метастабильны), такая инверсия приводит к метастабильному состоянию всей системы.

Теперь мы предложим рецепт, который позволяет стабилизировать начальную случайную конфигурацию локализованных спинов, расположенных на некой плоскости. Выберем точку на плоскости. Затем выберем некую замкнутую кривую (наиболее близкую к кругу), проходящую через ближайшие

состояния в окружении выбранного центра. Круговой рисунок выбран, поскольку он обеспечивает наименьшую длину границы для заданной площади, что приводит к меньшему разбросу энергии границы.

Если соответствующая «граница» имеет отрицательную энергию связи с окружением, мы делаем упомянутую выше операцию инверсии спина. После этого мы ищем следующую «границу», окружающую реконструируемую область. На каждом шаге мы считаем состояния внутри предыдущей границы устойчивыми, поэтому ищем новую границу вне стабилизировавшейся капли (кластера). Если энергия новой границы отрицательна, мы инвертируем спины в новом блоке, определяемом этой границей. Такую операцию можно повторять до тех пор, пока не будет достигнуто метастабильное состояние всего спинового стекла.

Важный фактор здесь связан с тем, что, согласно методике, на каждом шаге границы формируются из ближайших соседей вне ранее сформированной стабильной капли. Тем самым мы исключаем возможное пересечение границ.

После описанной процедуры мы получаем состояние спинового стекла, состоящего из макроспиновых капель. При нулевом поле энергия каждой капли положительна, что делает состояние стабильным. Однако конечное поле может привести к перевороту макроскопических капель, как обсуждалось выше.

Для оценки эффективной энергии границы начнем с функции распределения безразмерных энергий $x = \varepsilon/tJ_0$ для некоторой границы радиусом m . При большом размере m спин кластеров становится классическим. Поэтому есть три независимые энергии, связанные с декартовыми координатами. Поскольку эти энергии содержат большое количество членов, относящихся к почти независимым частям границы, они описываются нормальными распределениями. Совместное распределение для безразмерных энергий x_x , x_y и x_z выглядит следующим образом:

$$f_{x_x, x_y, x_z} = \frac{1}{(2\pi\sigma)^{3/2}} \times \exp\left[-\frac{(x_x - \bar{x})^2 + (x_y - \bar{x})^2 + (x_z - \bar{x})^2}{2\sigma}\right]. \quad (7)$$

Здесь $\bar{x}$ — средняя энергия для одной оси. Она положительна из-за описанного выше процесса инверсии спина, σ — безразмерная энергетическая дисперсия для каждой декартовой координаты $\sigma \sim \pi m(1 - \gamma)$,

где πm — число спинов, составляющих границу, которую мы выбираем близкой к окружности. Средняя энергия равна $\bar{x} = \gamma\pi m$, где γ описывает отношение некомпенсированных положительных вкладов в граничную энергию, относящихся к разным узлам. Именно это среднее значение учитывает основную часть эффекта стабилизирующих перестроек изначально случайного распределения спинов.

Важно, что существует множество способов определения границы капли. Уравнение (7) описывает распределение энергии для одной границы. Однако спин капли будет перевернут, если ее энергия во внешнем поле отрицательна и больше по абсолютной величине, чем хотя бы одна из возможных граничных энергий. Рассмотрим все границы в круглой полоске радиусом m и шириной 2. Такой выбор ширины полоски существенно не влияет на наши результаты. Число всевозможных границ в выбранной полоске равно

$$N_{bou} = \exp(\ln 2)\pi m. \quad (8)$$

Уравнение (8) позволяет оценить распределение минимальной граничной энергии в поясе (для малых энергий) следующим образом:

$$\tilde{f}(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma)^{1/2}} \times \exp\left(-(x - \bar{x})^2/2\sigma + (1/3)(\ln 2)\pi m\right). \quad (9)$$

Это распределение описывает x_x , x_y и x_z . Множитель $1/3$ соответствует трем декартовым координатам.

Из уравнения (9) для распределения энергии $\tilde{f}(x)$ следует, что существует конечная вероятность того, что $x < 0$. Это, по-видимому, противоречит предположению, что мы описываем метастабильное состояние спинового стекла. Из-за быстрого экспоненциального убывания $\tilde{f}(x)$ при малых x эта вероятность пропорциональна $\tilde{f}(0)$. С учетом зависимости как $\bar{x}$, так и σ от m величина $\tilde{f}(0)$ равна

$$\tilde{f}(0) = e^{\pi m\delta}, \quad \delta = \frac{\ln 2}{3} - \frac{\gamma^2}{2}(1 - \gamma). \quad (10)$$

Число спинов на границе считаем большим, $m \gg 1$. В этом случае возможны две ситуации. Когда δ положителен, имеется большое количество отрицательных энергий и уравнение (9) нельзя использовать для описания метастабильного состояния спинового стекла, по крайней мере, при заданных значениях $\bar{x}$ и σ . Однако, когда $\delta < 0$, $\exp(\pi m\delta)$ стремится к нулю при $m \rightarrow \infty$. Это означает, что вероятностью отрицательной энергии можно пренебречь

и уравнение (9) действительно соответствует устойчивому состоянию (можно предположить, что очень малая вероятность получения $x < 0$ связана с очень разреженными каплями, которые все еще должны быть перевернуты по спине для достижения стабильности, но соответствующие перевороты спина не оказывают существенного влияния на статистику энергий капель). Это позволяет самосогласованно найти γ из условия $\delta = 0$. Решение соответствующего уравнения дает $\gamma \approx 0.55$.

Из-за очень большого количества возможных границ типичная минимальная энергия границы x_{min} может быть оценена следующим образом:

$$x_{min} \approx \frac{1}{\partial \tilde{f} / \partial x|_{x=0}}. \quad (11)$$

При условии $\delta = 0$ это приводит к $x_{min} \propto m^{-1/2}$ или к энергии переворота спина для обсуждаемой полосы

$$\varepsilon \sim tJ_0 m^{-1/2}. \quad (12)$$

В области диаметром примерно m можно найти порядка $m^{1/2}$ независимых полосок. Энергии полосок случайны, что приводит к следующей оценке минимальной граничной энергии в капле шириной $\sim m$:

$$E_b \sim tJ_0 m^{-1}. \quad (13)$$

Зависимость $E_b \propto m$ является основным результатом этого раздела, приводящим к линейному магнитосопротивлению.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы привели экспериментальные результаты, показывающие, что легированные бериллием квантовые ямы GaAs/AlGaAs обнаруживают свойства, характерные для спинового стекла. Аномальный магнитотранспорт объясняется как проявление ферромагнитного перехода или спинового стекла, возникающего вследствие непрямого спинового обменного взаимодействия примесей вблизи перехода МИ. Для такого типа спинового стекла мы предложили модель, в которой, начиная с совершенно разупорядоченных спинов и применив процедуру обращения спинов, было получено некое метастабильное состояние. Мы рассмотрели сценарий с одним кластером, но идентификация разных кластеров несколько искусственна. Только степени свободы, связанные с кластером, позволяют идентифицировать его. До приложения внешнего магнитного поля мы можем только обсуждать доступные «граничные траектории» с некоторыми «граничными энергиями»,

окружающими виртуальными кластерами, которые могут перемагничиваться под действием соответствующих магнитных полей. Мы делаем вывод, что наибольший размер, который еще позволяет идентифицировать отдельные кластеры, определяется температурой и внешним магнитным полем и диктуется равенством между температурой и граничной энергией. Повышение температуры или внешнего магнитного поля приводит к перестройке конфигураций кластеров. Поскольку для размера кластеров не существует другого пространственного масштаба, кроме связанного с граничной энергией, можно сделать вывод, что картину можно рассматривать как плотно упакованную структуру кластеров с периодом и реализацией, зависящими от магнитного поля, температуры и предыстории.

ПРИЛОЖЕНИЕ ЗНАЧЕНИЕ δ

1. Увеличение δ по сравнению с его значением $\delta = 0$ приводит к увеличению беспорядка. Действительно, дисперсия граничной энергии σ максимальна для чисто случайной ситуации. Увеличение среднего значения, описываемого γ , соответствует подавлению беспорядка, а уменьшение γ (приводящее к увеличению δ) соответствует увеличению беспорядка. На самом деле $\sigma \propto m(1 - \gamma)$ и обращается в нуль при $\gamma = 1$. Поскольку увеличение энтропии (т.е. беспорядка) предпочтительнее при условии, что нет другого ограничения, связанного с минимальной энергией. Последнее диктуется критерием устойчивости. Таким образом, мы заключаем, что существуют две противоположные тенденции: увеличение беспорядка происходит предпочтительно за счет увеличения энтропии, а уменьшение беспорядка позволяет поддерживать стабильность. Таким образом, предпочтительная ситуация соответствует максимальному беспорядку (наибольшая δ), еще позволяющему поддерживать устойчивость.

2. Зависимость δ от m . Можно ожидать, что дисперсия граничной энергии для данного пограничного участка зависит от количества доступных соседних участков в окружении. Последнее зависит от фазового объема, доступного для этих соседних узлов. Этот фазовый объем, естественно, зависит от кривизны границы. Соответствующий угол задается как

$$\pi + 2 \arcsin(a/R),$$

где a — расстояние между узлами (которое мы считали единицей), а $R = m/2$ — радиус границы. Таким образом, мы заключаем, что дисперсия

граничной энергии имеет добавку, уменьшающуюся с ростом $m \propto 1/m$. Поскольку уменьшение дисперсии означает уменьшение беспорядка, мы заключаем, что оно приводит к уменьшению положительной δ , так как положительная δ означает уменьшение среднего значения, заданного γ .

Благодарности. Авторы благодарны А. В. Шумилину за полезное обсуждение результатов данной работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. T. Dietl and H. Ohno, *Rev. Mod. Phys.* **86**, 187 (2014).
2. E. Nielsen and R. N. Bhatt, *Phys. Rev. B* **82**, 195117 (2010).
3. J. Kundrotas and A. Cerskus, *J. Appl. Phys.* **103**, 123108 (2008).
4. А. В. Шумилин, В. И. Козуб, Н. В. Агринская, Н. Ю. Михайлин, Д. В. Шамшур, *ЖЭТФ* **159**, 915 (2021).
5. N. V. Agrinskaya, V. I. Kozub, Yu. M. Galperin, and D. V. Shamshur, *J. Phys.: Cond. Matt.* **20**, 395216 (2008).
6. N. V. Agrinskaya, V. I. Kozub, N. Y. Mikhailin, and D. V. Shamshur, *JETP Lett.* **105**, 484 (2017).
7. Н. В. Агринская, Н. Ю. Михайлин, Д. В. Шамшур, *ЖЭТФ* **162**, 127 (2022).
8. A. P. Li, J. F. Wendelken, J. Shen, L. C. Feldman, J. R. Thompson, and H. H. Weitering, *Phys. Rev. B* **72**, 195205 (2005).
9. Hui Lin Zhao, B. Z. Spivak, M. P. Gelfand, and Shechao Feng, *Phys. Rev. B* **44**, 10760 (1991).
10. D. S. Fisher and D. A. Huse, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 1601 (1986).
11. F. Liers and O. C. Martin, *Phys. Rev. B* **76**, 060405 (R) (2007).

ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА В ДИХАЛЬКОГЕНИДАХ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ В СКРЕЩЕННЫХ ПОЛЯХ

Л. И. Магарилл^{a,b}, А. В. Чаплик^{a,b**}*

*^a Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова
Сибирского отделения Российской академии наук
630090, Новосибирск, Россия*

*^b Новосибирский государственный университет
630090, Новосибирск, Россия*

Поступила в редакцию 9 мая 2023 г.,
после переработки 9 мая 2023 г.
Принята к публикации 31 мая 2023 г.

Найдены точные аналитические выражения для спектра и волновых функций электронов в монослое дихалькогенидов переходных металлов в скрещенных электрическом и магнитном полях. Рассчитана зависимость интенсивности межзонных переходов от электрического поля. Долинная селективность межзонного поглощения существенно зависит от электрического поля и может многократно менять знак при его увеличении

DOI: 10.31857/S0044451023110111

EDN: PKCVLM

1. ВВЕДЕНИЕ

Магнитопоглощение света, связанное с межзонными переходами, широко используется в физике полупроводников как метод определения параметров материала. Наложение сильного электрического поля перпендикулярно магнитному (скрещенные поля), как было показано еще Ароновым, а также Ароновым и Пикусом [1], позволяет получить дополнительное уравнение для эффективных масс в зонах, участвующих в переходах. Таким образом, оказывается возможным в одном эксперименте измерить оба этих независимых параметра.

Большой интерес к физике монослоев дихалькогенидов переходных металлов (ДХПМ), возникший в последние годы, привел и к развитию теории магнитооптических эффектов в этих материалах. Весьма интересной их особенностью является так называемая долинная селективность межзонного поглощения, т. е. избирательные переходы электронов из валентной зоны в зону проводимости в той или

иной долине (традиционное обозначение K и K') в зависимости от знака круговой поляризации падающей световой волны. Подробный анализ оптического магнитопоглощения монослоем ДХПМ содержится в работе Розе с соавторами [2]. В работе [3] найдены компоненты тензора высокочастотной проводимости в нормальном к монослою магнитном поле, причем учтены анизотропные поправки к зонной структуре ДХМП, а в работе [4] изучено влияние легирования на оптическое поглощение. Интересным оказался вывод авторов о наличии в случае легированного образца сильной долинной селективности также и при возбуждении линейно-поляризованным светом. Работы [2–4] основаны на принятой в литературе двухзонной двухдолинной модели ДХПМ с гамильтонианом дираковского типа для массивных частиц, в который дополнительно введен параметр $\tau = \pm 1$, отмечающий киральность долин. Электрическое поле в указанных теоретических исследованиях отсутствует. Оно учтено в работе [5] для случая параллельных магнитного и электрического полей (по нормали к слою). При этом в гамильтониане возникает постоянный член, перенормирующий щель в спектре. Таким образом, ситуация скрещенных полей остается пока не исследованной.

В предлагаемой работе получено точное аналитическое решение системы уравнений для спинор-

* E-mail: levni@isp.nsc.ru

** E-mail: chaplik@isp.nsc.ru

ных волновых функций электрона в двухзонной дираковской модели в скрещенных электрическом и магнитном полях. На основе полученного решения найдены интенсивности межзонных оптических переходов как разрешенных, так и запрещенных в отсутствие электрического поля. Исследовано влияние поля на долинную селективность. Ввиду большой громоздкости аналитических формул конечные результаты даны в виде графиков, полученных численными расчетами.

2. МОНОСЛОЙ ДИХАЛЬКОГЕНИДОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ (ДХПМ)

Для описания монослоя ДХПМ воспользуемся простейшим вариантом двухзонной модели [6, 7], в котором пренебрегается спиновым расщеплением зон и введено однородное электрическое поле $\mathbf{E}$ параллельное оси x . Гамильтониан используемой модели

$$\hat{H} = \gamma \sigma_\tau \left(\hat{k} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) + \frac{\Delta}{2} \sigma_z + eEx\sigma_0, \quad (1)$$

$$\sigma_\tau = (\tau \sigma_x, \sigma_y),$$

где $\tau = \pm 1$ — долинный индекс, $\sigma_{x,y,z}$ — матрицы Паули, σ_0 — единичная (2×2) -матрица, $\hat{k}$ — 2D-импульс, Δ — ширина запрещенной зоны. Собственные функции гамильтониана (1) являются двухкомпонентными спинорами

$$\Psi(x, y) = \Phi(x) \exp\{iky\} / \sqrt{L_y},$$

$$\Phi(x) = (\psi_1(t), \psi_2(t))^T,$$

вместо x вводится переменная

$$t = q(x/l + \kappa l)$$

(q и κ — подбираемые параметры).

Функции $\psi_{1,2}(t)$ удовлетворяют следующей системе уравнений:

$$\left[\frac{\Delta}{2} - \varepsilon + eEl \left(\frac{t}{q} - \kappa l \right) \right] \psi_1(t) -$$

$$- \frac{i\Omega}{\sqrt{2}} \left[\tau q \frac{d\psi_2(t)}{dt} + \left(\frac{t}{q} + \kappa l - \kappa l \right) \psi_2(t) \right] = 0, \quad (2)$$

$$\frac{i\Omega}{\sqrt{2}} \left[\tau q \frac{d\psi_1(t)}{dt} - \left(\frac{t}{q} + \kappa l - \kappa l \right) \psi_1(t) \right] -$$

$$- \left[\frac{\Delta}{2} + \varepsilon - eEl \left(\frac{t}{q} - \kappa l \right) \right] \psi_2(t) = 0.$$

Здесь ε — энергия, $\Omega = \gamma\sqrt{2}/l$.

Решение системы (2) может быть найдено таким же образом, как в работе [8], в которой решена задача о дираковском электроне в скрещенных полях. Ищем $\psi_1(t)$ и $\psi_2(t)$ в виде линейных комбинаций осцилляторных функций $f_n(t)$, $f_{n-1}(t)$:

$$\psi_{1,2}(t) = \alpha_{1,2} f_n(t) + \beta_{1,2} f_{n-1}(t). \quad (3)$$

Производные в (2) исключаются с помощью рекуррентных соотношений для функций f_n :

$$f'_n = \sqrt{2n} f_{n-1} - t f_n, \quad f'_{n-1} = t f_{n-1} - \sqrt{2n} f_n. \quad (4)$$

Далее приравниваем нулю коэффициенты при всех содержащих t членах в обоих уравнениях (2). В результате приходим к системе восьми уравнений относительно четырех неизвестных $\alpha_{1,2}$ и $\beta_{1,2}$:

$$\left(\frac{\Delta}{2} - \varepsilon - \kappa v_d \right) \alpha_1 + i\gamma(\kappa - k) \alpha_2 +$$

$$+ i\Omega q \tau \sqrt{n} \beta_2 = 0, \quad (5)$$

$$v_d \alpha_1 - i\gamma(1 - q^2 \tau) \alpha_2 = 0, \quad (6)$$

$$\left(\frac{\Delta}{2} - \varepsilon - \kappa v_d \right) \beta_1 + i\gamma(\kappa - k) \beta_2 -$$

$$- i\Omega q \tau \sqrt{n} \alpha_2 = 0, \quad (7)$$

$$v_d \beta_1 - i\gamma(1 + q^2 \tau) \beta_2 = 0, \quad (8)$$

$$i\gamma(\kappa - k) \alpha_1 - \left(\frac{\Delta}{2} + \varepsilon + \kappa v_d \right) \alpha_2 +$$

$$+ i\Omega q \tau \sqrt{n} \beta_1 = 0, \quad (9)$$

$$i\gamma(1 + q^2 \tau) \alpha_1 + v_d \alpha_2 = 0, \quad (10)$$

$$i\Omega q \tau \sqrt{n} \alpha_1 + i\gamma(\kappa - k) \beta_1 +$$

$$+ \left(\frac{\Delta}{2} + \varepsilon + \kappa v_d \right) \beta_2 = 0, \quad (11)$$

$$i\gamma(1 - q^2 \tau) \beta_1 + v_d \beta_2 = 0, \quad (12)$$

где $v_d = cE/H$ — дрейфовая скорость. Нас интересуют величины $\alpha_{1,2}$ и $\beta_{1,2}$, дающие общее решение уравнений (5)–(12).

Из пары уравнений (6) и (10) находим

$$q = (1 - \bar{v}_d^2)^{1/4}, \quad (13)$$

где $\bar{v}_d = v_d/\gamma$. Тот же результат получается из другой пары (8) и (12). Одновременно находится связь α_1 с α_2 и β_2 с β_1 :

$$\alpha_1 = i \frac{\bar{v}_d}{1 + q^2 \tau} \alpha_2, \quad \beta_2 = -i \frac{\bar{v}_d}{1 + q^2 \tau} \beta_1. \quad (14)$$

Подставив (14) в оставшиеся уравнения системы (5)–(12), приходим к системе четырех уравнений для величин α_2 , β_1 :

$$\left(\frac{\bar{v}_d \left(\frac{\Delta}{2} - \varepsilon - \kappa v_d \right)}{(1 + q^2 \tau)} + \gamma(\kappa - k) \right) \alpha_2 - \frac{i \Omega q \bar{v}_d \tau \sqrt{n}}{(1 + q^2 \tau)} \beta_1 = 0, \quad (15)$$

$$\left(\frac{\Delta}{2} - \varepsilon - \kappa v_d + \frac{v_d(\kappa - k)}{1 + q^2 \tau} \right) \beta_1 - i \Omega q \tau \sqrt{n} \alpha_2 = 0, \quad (16)$$

$$\left(\frac{\Delta}{2} + \varepsilon + \kappa v_d - \frac{v_d(\kappa - k)}{1 + q^2 \tau} \right) \alpha_2 - i \Omega q \tau \sqrt{n} \beta_1 = 0, \quad (17)$$

$$\left(\frac{\bar{v}_d \left(\frac{\Delta}{2} + \varepsilon + \kappa v_d \right)}{(1 + q^2 \tau)} - \gamma(\kappa - k) \right) \beta_1 - \frac{i \Omega q v_d \tau \sqrt{n}}{\gamma(1 + q^2 \tau)} \alpha_2 = 0. \quad (18)$$

В этой системе q — уже известный параметр (формула (13)).

Далее берем пару уравнений (15) и (17), вычисляем соответствующий детерминант и ищем его корень относительно κ . Получаем

$$\kappa = \frac{k + \varepsilon v_d / \gamma^2}{q^4}. \quad (19)$$

Продельвая ту же процедуру с парой уравнений (16) и (18), приходим к такому же результату.

А теперь берем уравнения (16) и (17), подставляя в них найденное выражение для κ и ищем корень соответствующего детерминанта относительно ε . В результате получаем для спектра

$$\varepsilon_{\lambda,n}(k) = \lambda q^2 w_n - \kappa v_d, \quad w_n = \sqrt{\frac{\Delta^2}{4} + q^2 n \Omega^2}, \quad (20)$$

где $\lambda = \pm 1$ — зонный индекс (+1 соответствует зоне проводимости, -1 — валентной зоне). Отметим, что спектр не зависит от долинного индекса.

Теперь построим собственные функции $\Phi_{\lambda,n}^{(\tau)}$. Для долины $\tau = +1$ имеем

$$\Phi_{\lambda,n \geq 1}^{(\tau=+1)}(x) = \frac{1}{N_{\lambda,n}} \times \left(-\bar{v}_d \sqrt{n} q \Omega f_n(t) / (1 + q^2) + a_{\lambda,n} f_{n-1}(t) \right) \times \left(i \sqrt{n} q \Omega f_n(t) - i \bar{v}_d a_{\lambda,n} f_{n-1}(t) / (1 + q^2) \right). \quad (21)$$

Здесь

$$N_{\lambda,n} = \sqrt{2l(a_{\lambda,n}^2 + n q^2 \Omega^2) / (q(1 + q^2))}, \\ a_{\lambda,n} = \Delta / 2 + \lambda w_n.$$

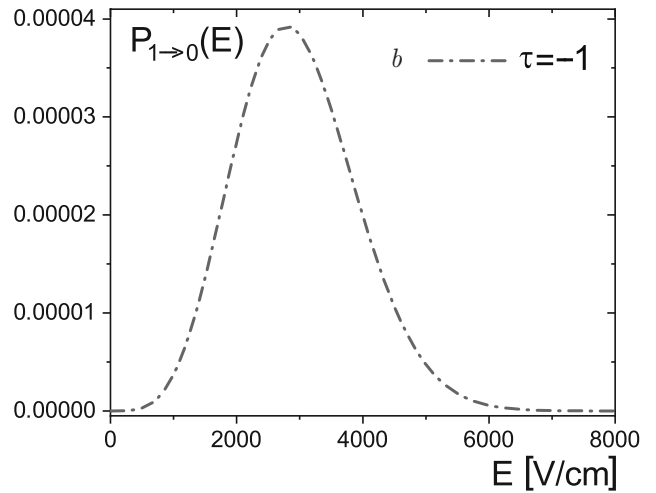
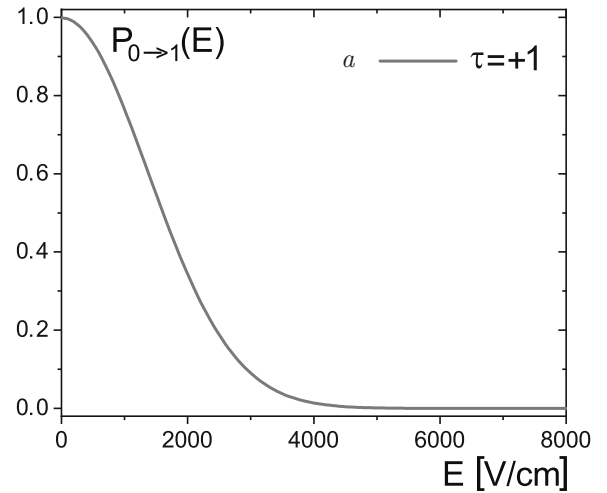


Рис. 1. Зависимость интенсивности поглощения от E на переходах $0 \rightarrow 1$ (в долине $\tau = +1$) и $1 \rightarrow 0$ (в долине $\tau = -1$)

Аргумент t в осцилляторных функциях зависит от λ и n и дается выражением

$$t_{\lambda,n} = q \left(\frac{x}{l} + \kappa l + \frac{\lambda v_d w_n l}{q^2 \gamma^2} \right). \quad (22)$$

Состояние с $n = 0$ в долине $\tau = +1$ имеется только в валентной зоне, его волновая функция имеет вид

$$\Phi_{-1,0}^{(\tau=+1)}(x) = \sqrt{\frac{1 + q^2}{2}} \begin{pmatrix} i \bar{v}_d / (1 + q^2) \\ 1 \end{pmatrix} f_0(t_{-1,0}). \quad (23)$$

Для волновых функций состояний в долине $\tau = -1$ получаем

$$\Phi_{\lambda,n \geq 1}^{(\tau=-1)}(x) = \frac{1}{N_{\lambda,n}} \times \begin{pmatrix} a_{\lambda,n} f_n(t) - \bar{v}_d \sqrt{n} q \Omega f_{n-1}(t) / (1 + q^2) \\ -i \bar{v}_d a_{\lambda,n} f_n(t) / (1 + q^2) + i \sqrt{n} q \Omega f_{n-1}(t) \end{pmatrix}, \quad (24)$$

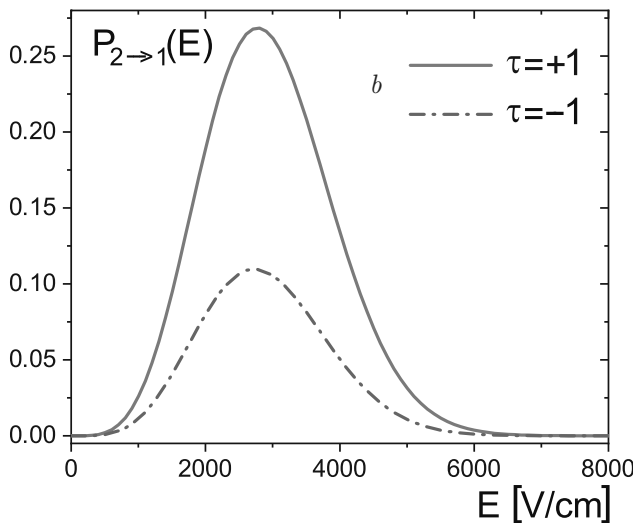
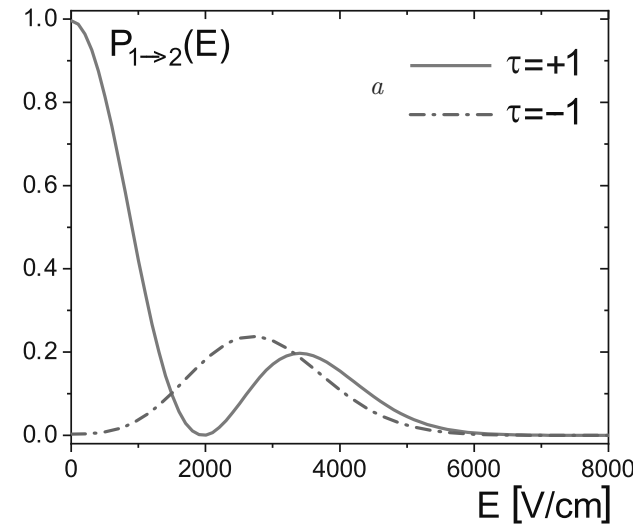


Рис. 2. Зависимость интенсивностей поглощения от E на переходах $1 \rightarrow 2$ (a) и $2 \rightarrow 1$ (b)

$$\Phi_{1,0}^{(\tau=-1)}(x) = \sqrt{\frac{1+q^2}{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i\bar{v}_d/(1+q^2) \end{pmatrix} f_0(t_{1,0}). \quad (25)$$

При $E = 0$ выражения для собственных функций (21), (23), (24), (25) и для спектра (20) переходят в формулы, полученные в работе [2].

3. МЕЖЗОННЫЕ ПЕРЕХОДЫ

С полученными выражениями для спинорных собственных функций находим матричные элементы переходов, вызванных взаимодействием с падающей плоской электромагнитной волной.

Для пространственно-однородной волны оператор взаимодействия при круговой поляризации в

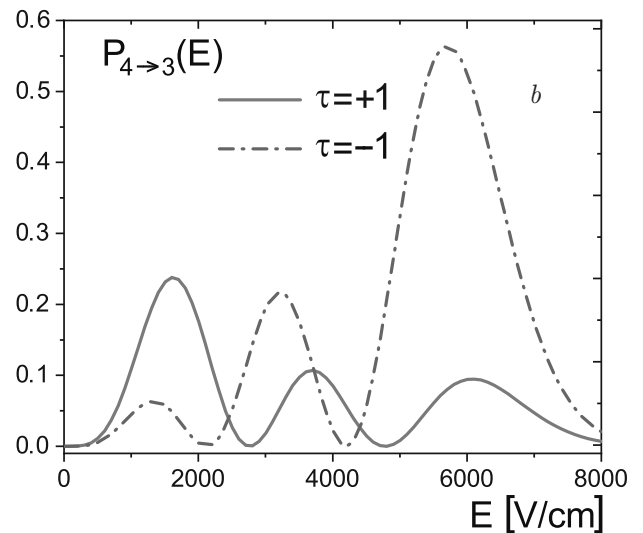
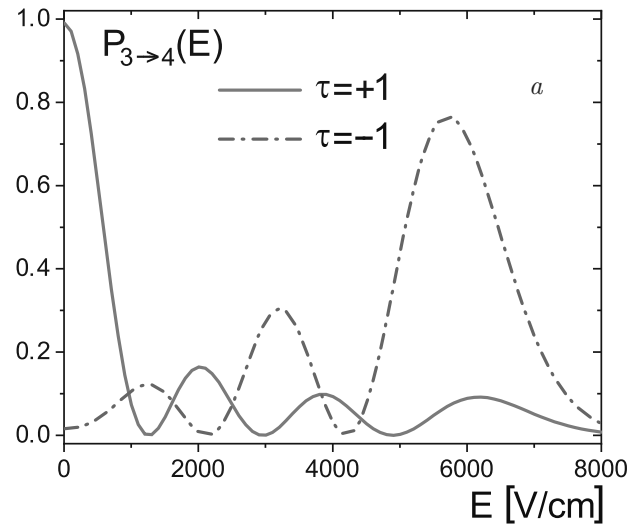


Рис. 3. То же, что на рис. 2, для переходов $3 \rightarrow 4$ (a) и $4 \rightarrow 3$ (b)

рамках используемой двухзонной модели имеет вид

$$\hat{H}_{int} = e\gamma\mathcal{A}_0\hat{h}_{\tau,\xi}\exp\{-i\omega t\} + \text{Н. с.}, \quad (26)$$

$$\hat{h}_{\tau,\xi} = \frac{1}{2}(\tau\sigma_x + i\xi\sigma_y) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & \tau + \xi \\ \tau - \xi & 0 \end{bmatrix},$$

где $\xi = \pm 1$ — индекс поляризации, $\mathcal{A}_0$ — амплитуда волны.

Вероятность переходов $(\lambda, n) \rightarrow (\lambda', n')$, определяемая квадратом матричного элемента оператора взаимодействия (26), пропорциональна величине

$$P_{\lambda',n',\lambda,n}^{(\tau,\xi)} = \left| \langle \Phi_{\lambda',n'}^{(\tau)} | \hat{h}_{\tau,\xi} | \Phi_{\lambda,n}^{(\tau)} \rangle \right|^2. \quad (27)$$

Здесь $\langle \dots \rangle$ означает интегрирование по координатам, $\Phi_{\lambda,n}^{(\tau)}$ — нормированные спиноры состояний (λ, n) в долине τ , которые даются формулами (21), (23)-(25).

Зависящая от электрического поля величина $P_{\lambda', n', \lambda, n}^{(\tau, \xi)}$ определяет интенсивность поглощения (или испускания) на резонансной частоте $\omega_{res} = \varepsilon_{+1, n'} - \varepsilon_{-1, n}$.

Общее выражение для $P(E)$ весьма громоздко. Далее мы приводим результаты численного расчета величин $P(E)$, которые определяют интенсивности поглощения при переходах на соответствующей каждому резонансной частоте. Построенные кривые показывают зависимость интенсивности от приложенного электрического поля при заданном значении магнитного. Параметры материала соответствуют MoS_2 , магнитное поле равно 10 Тл, поляризация везде $\xi = +1$. Валентная зона предполагается полностью заполненной, зона проводимости — полностью свободной.

Как и в обычных полупроводниках (см. [1]), электрическое поле уменьшает интенсивность разрешенных переходов (в ДХПМ это переходы с изменением номера уровня Ландау на $+1$ или -1 в зависимости от номера долины и знака круговой поляризации света) и снимает запрет на переходы, нарушающие это правило (см. рис. 1, 2, 3).

Обратим внимание на своеобразную «осциллирующую конкуренцию» интенсивностей переходов между уровнями с большими номерами на рис. 3 *a, b*. Интенсивности разрешенного и запрещенного при $E = 0$ переходов практически выравниваются в полях порядка 2 кВ/см. Заметим еще, что, например, переход 2 в 1 при $E = 0$ запрещен в обеих долинах, однако разрешенный переход $1 \rightarrow 2$ происходит при точно такой же частоте и поляризации (с различной интенсивностью в разных долинах). При противоположной поляризации то же самое получается при перестановке долин. В итоге обе поляризации поглощаются на данной частоте с одинаковой вероятностью, т. е. поляризационной селективности в полном поглощении нет. Увеличение числа максимумов и минимумов величины $P(E)$ объясняется сложной зависимостью степени перекрытия волновых функций состояний, участвующих в переходе, от электрического поля: соответствующий интеграл берется от произведения полиномов Эрмита со сдвинутыми друг относительно друга аргументами. Величина сдвига зависит от E , что и приводит к осцилляциям интенсивности при изменении электрического поля.

Характерной особенностью ДХПМ является различная вероятность поглощения света одной и той же частоты электронами разных долин (долинная селективность). Результатом является дисбаланс неравновесных заселенностей долин, что может наблюдаться экспериментально. Такой эксперимент осуществлен в работе [9], где долинная селективность проявилась в поляризационном составе люминесцентного излучения из монослоя MoS_2 . Как следует из результатов данной статьи, электрическое поле существенно влияет на разность заселенностей долин, что открывает новые возможности для исследования оптической долинной селективности.

ЛИТЕРАТУРА

1. А. Г. Аронов, ФТТ **5**, 552 (1963), A. G. Aronov and G. E. Pikus, Sov. Phys. JETP **24**, 339 (1967) [Zh. Eksp. Teor. Fiz. **51**, 505 (1966)].
2. F. Rose, M. O. Goerbig, and F. Piechon, Phys. Rev. B **88**, 125438 (2013).
3. M. Tahir and P. Vasilopoulos, Phys. Rev. B **94**, 045415 (2016).
4. G. Catarina, J. Have, J. Fernandez-Rossier, and N. M. R. Peres, Phys. Rev. B **99**, 125405 (2019).
5. Nguyen D. Hien, Chuong V. Nguyen, Nguyen N. Hieu, S. S. Kubakaddi, C. A. Duque, M. E. Mora-Ramos, Le Dinh, Tran N. Bich, and Huynh V. Phuc, Phys. Rev. B **101**, 045424 (2020).
6. Di Xiao, Gui-Bin Liu, Wanxiang Feng, Xiaodong Xu, and Wang Yao, Phys. Rev. Lett. **108**, 196802 (2012).
7. A. Kormanyos, G. Burkard, M. Gmitra, J. Fabian, V. Zolyomi, N. D. Drummond, and V. Falko, 2D Materials **2**, 022001 (2015).
8. В. Г. Баргов, В. А. Бордовицын, Известия ТПИ **156**, 215 (1969).
9. Ting Cao, Gang Wang, Wenpeng Han, Huiqi Ye, Chuanrui Zhu, Junren Shi, Qian Niu, Pingheng Tan, Enge Wang, Baoli Liu, and Ji Feng, Nat. Commun. **3**, 887 (2012).

ВЛИЯНИЕ ШУМА НА РЕЗИСТИВНОЕ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЕ МЕМРИСТОРА НА ОСНОВЕ СТАБИЛИЗИРОВАННОГО ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ

О. Н. Горшков^{}, Д. О. Филатов, М. Н. Коряжская, В. А. Лобанова, М. А. Рябова*

*Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского
603022, Нижний Новгород, Россия*

Поступила в редакцию 8 июня 2023 г.,
после переработки 8 июня 2023 г.
Принята к публикации 27 июня 2023 г.

Исследовано влияние гауссова шума на переключение мемристора на основе $\text{ZrO}_2(\text{Y})$ из низкорезистивного состояния (НРС) в высокорезистивное состояние (ВРС), включая переход из НРС в промежуточные метастабильные состояния. В качестве переключающих сигналов использовалась последовательность положительных (с добавлением или без добавления шумового сигнала) и отрицательных прямоугольных импульсов напряжения. Добавление шума к переключающему сигналу инициирует переключение мемристора из НРС в ВРС при меньших амплитудах импульсов, чем в случае переключения прямоугольными импульсами без наложения шума. Добавлением шума с определенными параметрами к прямоугольным переключающим импульсам может быть достигнуто необходимое (заданное) ВРС, минуя промежуточные состояния. При этом резистивное переключение реализуется без применения адаптивных протоколов переключения. Результаты настоящего исследования могут быть применены при разработке инновационных протоколов переключения мемристоров.

DOI: 10.31857/S00044451023110123

EDN: PKELZQ

1. ВВЕДЕНИЕ

Мемристоры являются ключевыми элементами в устройствах нового поколения энергонезависимой памяти — резистивной памяти с произвольным доступом (Resistive Random Access Memory, RRAM) [1]. Начиная с пионерской работы Струкова с сотрудниками [2], мемристоры стали популярным объектом исследования. Разработка надежных элементов RRAM на основе мемристоров с воспроизводимыми и стабильными характеристиками является одной из наиболее актуальных научно-технических задач современных информационных технологий. Однако проблема нестабильности параметров резистивного переключения (РП) мемристоров, в частности напряжений переключения между резистивными состояниями в элементах памяти, ограничивает их широкое практическое внедрение [3]. С од-

ной стороны, разброс параметров РП имеет фундаментальное происхождение, а именно, стохастическая природа процессов, лежащих в основе явления РП [4]. С другой стороны, это также и технологическая проблема, поскольку стохастичность мемристоров зависит от свойств используемых материалов, технологии изготовления мемристорной структуры и от протоколов переключения.

На сегодняшний день в большинстве разработанных конструкций мемристоров реализуется так называемый филаментарный механизм РП, заключающийся в образовании и разрушении проводящих шнуров (филаментов) внутри функционального диэлектрика под действием электрического поля между электродами [5]. В мемристорах на основе оксидов металлов филаменты состоят, как правило, из вакансий кислорода [6], в так называемых мемристорах типа «проводящий мостик» (Conductive Bridge, CB) — из атомов металла, инжектируемых в функциональный диэлектрик из электродов [7]. Обычно переключение мемристора из низкорезистивного состояния (НРС) в высокорезистивное состояние (ВРС) и обратно из ВРС в НРС проходит путем разрушения и восстановления структуры филамен-

^{*} E-mail: gorshkov@nifti.unn.ru

та вблизи границы с химически активным электродом мемристора (на расстоянии около нескольких нм). С другой стороны, толщина (диаметр) филамента может также составлять несколько нм. Таким образом, вне зависимости от размеров самого мемристора, процессы РП происходят в малом объеме (порядка нескольких нм³) в области интерфейса филамента с активным электродом, а в процессе РП принимает участие небольшое (счетное) количество ионов (или вакансий).

При этом каждый прыжок иона на соседнюю вакансию существенно изменяет структуру филамента (и, следовательно, его проводимость). В результате таких прыжков флуктуации электронного тока мемристора как в НРС, так и в ВРС могут значительно превышать соответствующие средние значения.

Ранее Стотланд с сотрудниками предложили инновационный подход повышения стабилизации параметров РП, основанный на использовании эффекта конструктивной роли шума в мультстабильных стохастических системах [8]. В рамках данного подхода мемристор рассматривается как бистабильная (или мультстабильная) стохастическая система, которая может быть описана на основе модели броуновского движения частиц в бистабильном (или мультстабильном) потенциале. Самый простой случай — бистабильный потенциал, рассмотренный Крамерсом [9]. Действительно, ряд эффектов, присущих мультстабильным стохастическим системам, наблюдался в мемристорах экспериментально. В их числе переключение между ВРС и НРС в режиме случайного телеграфного сигнала под действием внешнего гауссова «белого» шума [10], стохастический резонанс [11], резонансная активация переключения между НРС и ВРС под действием внешнего периодического сигнала [12], переходная бимодальность [13], а также эффект увеличения времени релаксации резистивного состояния мемристора при переключении из НРС в ВРС под действием внутреннего (термического) [14] и внешнего [15] шума. В работах [16, 17] было показано, что добавление к переключающему импульсу напряжения гауссова шума с определенным стандартным отклонением увеличивает разницу сопротивления между LRS и HRS мемристора.

В настоящей работе экспериментально исследовано влияние добавления к прямоугольным переключающим импульсам шумового сигнала, имитирующего гауссов «белый» шум, на изменение резистивного состояния мемристора на основе структуры Ta(40 нм)/ZrO₂(Y)(20 нм)/Pt(20 нм) в ходе пере-

ключения из НРС в ВРС (так называемый процесс RESET), включая переход из НРС в промежуточные метастабильные состояния. Исследовано влияние параметров переключающих импульсов (амплитуды V_{offset} и длительности t_p импульсов), а также интенсивности шума σ на напряжение переключения из НРС в ВРС, отношение значений силы тока в НРС и ВРС и др.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Исследовались лабораторные макеты мемристоров на основе структуры металл–изолятор–металл Au(20 нм)/Ta(40 нм)/ZrO₂(Y)(20 нм)/Pt(20 нм)/Ti(5 нм), нанесенной методом магнетронного распыления на стандартную подложку *p*-Si(001) с предварительно нанесенным слоем SiO₂ толщиной 700 нм. Использовалась вакуумная установка для осаждения тонких пленок Torr International 2G1-1G2-EB4-TN1. Пленки ZrO₂(Y) наносились методом высокочастотного магнетронного распыления мишени, спрессованной из смеси порошков ZrO₂ (88% мол.) и Y₂O₃ (12% мол.), при температуре подложки $T_g = 250^\circ\text{C}$. Металлические контакты наносились методом магнетронного распыления на постоянном токе при $T_g = 200^\circ\text{C}$. Мемристорные структуры типа кросс-пойнт с размерами активной области $20 \times 20 \text{ мкм}^2$ формировались стандартным методом фотолитографии с использованием фотолитографической линейки производства НПО «Планар» (Беларусь).

Подробнее методика изготовления мемристоров, а также результаты измерений их электрических параметров изложены в [15].

Исследования влияния шума на РП проводились при помощи USB модуля АЦП/ЦАП National Instruments USB ADC/DAC 6341 под управлением программного обеспечения LabVIEW. Схема экспериментальной установки показана на рис. 1а. Электрические контакты к контактным площадкам мемристоров обеспечивались с помощью зондовой станции EverBeing EB-6. Электрические характеристики исследованных мемристоров были измерены с использованием анализатора параметров полупроводниковых устройств Agilent B1500A. Ток ограничения был 300 мкА при $V[B] < 0$. Циклические вольт–амперные характеристики (ВАХ) после формовки представлены на рис. 2а.

В эксперименте на мемристор подавалась последовательность чередующихся положительных (с добавлением или без добавления шума) и отри-

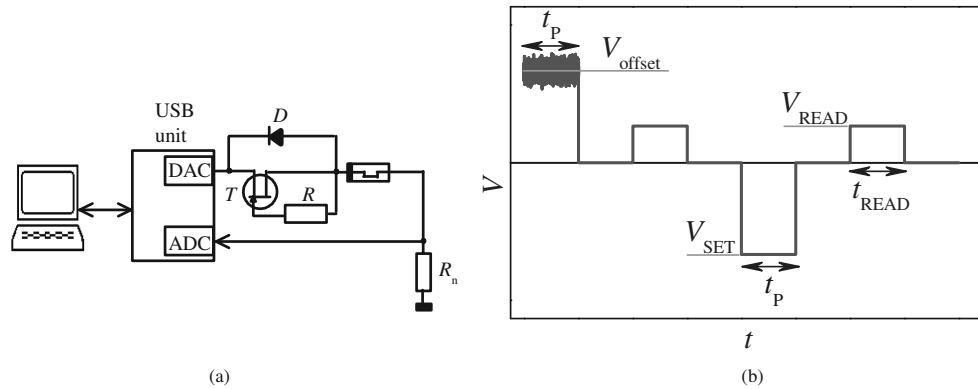


Рис. 1. Схемы экспериментальной установки (а) и единичного цикла переключающего сигнала $V(t)$ (б)

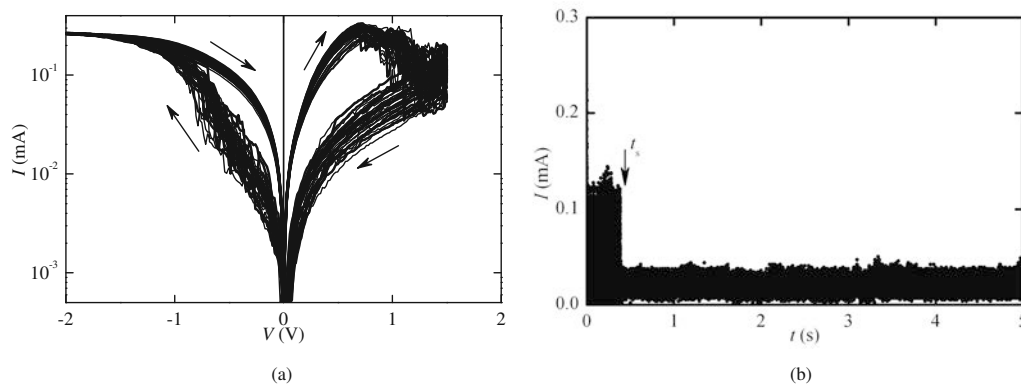


Рис. 2. Циклические ВАХ лабораторного макета мемристора (а); осциллограмма тока, протекающего через мемристор $I(t)$ в ходе переключения из НРС в ВРС при наложении шума на прямоугольный переключающий импульс (б).
 $V_{\text{offset}} = 1.0 \text{ В}$, $\sigma = 66 \text{ мВ}$

цательных прямоугольных импульсов напряжения (рис. 1б). Значение V_{offset} (равное амплитуде положительных переключающих импульсов без добавления шума) варьировалось от 0.6 В до 1.5 В. Выбранные значения V_{offset} охватывают диапазон напряжений от напряжения начала плавного процесса RESET (см. рис. 2а) до напряжения полного переключения из НРС в ВРС V_{RESET} . В случае переключения импульсами с добавлением шума интенсивность шума σ варьировалась от 0.05 В до 0.3 В. Амплитуда отрицательных импульсов напряжения, переключающих мемристор из ВРС обратно в НРС (так называемый процесс SET), была фиксированной: $V_{\text{SET}} = -2 \text{ В}$. Следует отметить, что в настоящей работе изучалось влияние шума только на процесс RESET, включая переход из НРС к некоторым промежуточным метастабильным состояниям между НРС и ВРС. Длительность положительных и отрицательных импульсов t_P варьировалась от 10 мкс до 5 мс. В рамках одного исследования

длительности положительных и отрицательных импульсов были равны друг другу. После каждого положительного и отрицательного импульсов измерялась сила тока через мемристор путем подачи импульсов чтения амплитудой $V_{\text{READ}} = 0.4 \text{ В}$ и длительностью $t_{\text{READ}} = 0.1 \text{ мс}$.

Случайный сигнал, имитирующий гауссов «белый» шум, был синтезирован в цифровом виде следующим образом. С использованием встроенного генератора псевдослучайных чисел программного обеспечения LabVIEW был сгенерирован массив случайных чисел с гауссовым распределением для заданного значения σ . Для генерации импульса переключения с шумом этот массив был добавлен к последовательности прямоугольных импульсов переключения. Затем полученный массив отправлялся в ЦАП USB модуля с частотой выдачи $f_0 = 2 \text{ МГц}$.

Синтезированный описанным выше образом переключающий сигнал подавался на исследуемый мемристор, последовательно подключенный к на-

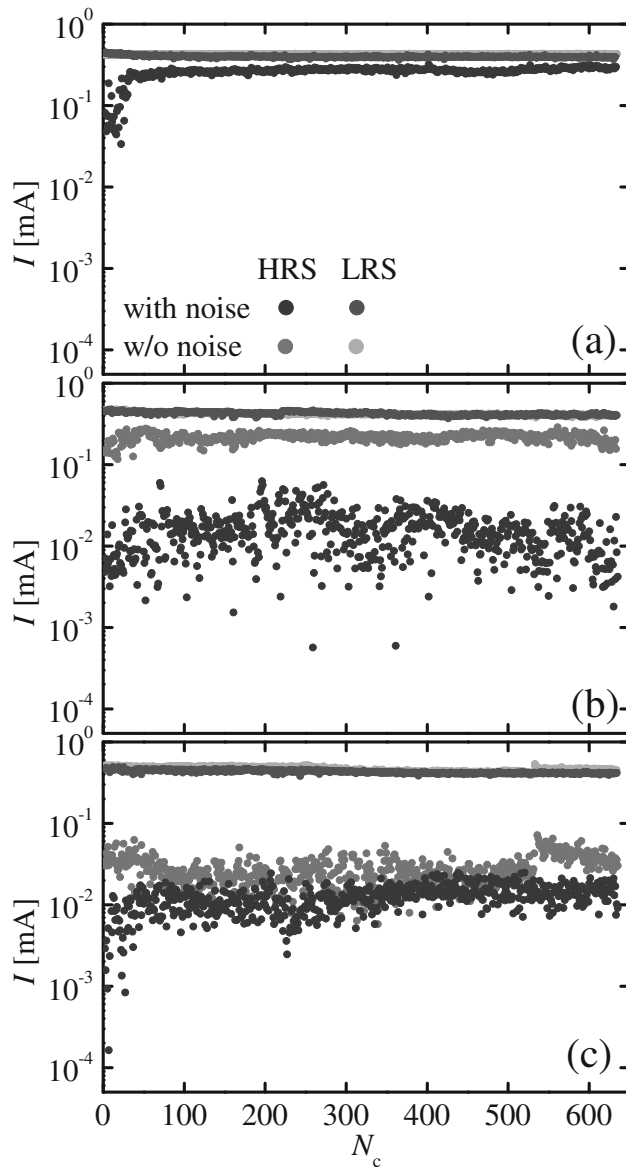


Рис. 3. Диаграммы выносливости мемристора для случая переключения прямоугольными импульсами с наложением шума и без. $V_{\text{offset}} = 1.0$ (a), 1.2 (b), 1.4 (c) В, $\sigma = 0.2$ В, $t_P = 10$ мкс

грузочному сопротивлению $R_n = 100$ Ом (рис. 1a). Измеряемый сигнал (пропорциональный силе тока I , протекающего через мемристор) снимался с нагрузочного резистора и направлялся на вход АЦП USB модуля. Частота дискретизации АЦП была установлена равной f_0 . Перед началом каждого измерения мемристор переводился в начальное проводящее состояние (НРС). Затем измерялся отклик мемристора на переключающий сигнал при заданных значениях V_{offset} , σ и t_P . На рис. 2b приведен пример осциллограммы тока через мемристор $I(t)$

в процессе перехода мемристора из НРС в ВРС под действием импульса с добавлением шума. При $t < t_s$ мемристор находится в исходном состоянии (НРС); усредненное по этому интервалу времени значение $\langle I(t) \rangle = I_{\text{ON}}$. Момент времени $t = t_s$ соответствует переходу из НРС в ВРС. При $t > t_s$ мемристор остается в ВРС; соответственно, $\langle I(t) \rangle = I_{\text{OFF}}$.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 3 показан пример диаграммы выносливости (зависимости I_{ON} и I_{OFF} от количества циклов переключений N_c) при переключении прямоугольными импульсами с добавлением и без добавления шума.

Наложение шума приводит к уменьшению среднего значения I_{OFF} при равных значениях V_{offset} . Отношение $I_{\text{ON}}/I_{\text{OFF}}$, соответственно, возрастает. На рис. 4 показаны зависимости отношения $I_{\text{ON}}/I_{\text{OFF}}$ от V_{offset} при переключении прямоугольными импульсами с добавлением и без добавления шума для различных значений t_P . Пороговое значение V_{offset} , необходимое для изменения резистивного состояния мемристора (включая переключение из НРС в ВРС), уменьшается при переключении импульсами с добавлением шума по сравнению с переключением без шума.

Увеличение t_P также приводит к уменьшению порогового значения напряжения V_{offset} , при котором происходит изменение резистивного состояния мемристора. Например, в случае переключения с наложением шума, при $t_P = 10$ мкс переход в менее проводящее состояние происходит при $V_{\text{offset}} = 1.0$ В, а при $t_P = 50$ мкс — при $V_{\text{offset}} = 0.8$ В (ср. рис. 4a, b). Влияние t_P на характеристики процесса RESET может быть объяснено с учетом известного соотношения, называемого «дилемма напряжение–время» («voltage–time dilemma» [18]):

$$V_s \times \tau_s \sim A_s, \quad (1)$$

где V_s и τ_s — амплитуда и длительность переключающего импульса соответственно, A_s — константа. В соответствии с (1), чем больше амплитуда переключающего импульса V_s , тем меньше время требуется для переключения мемристора.

Эффект уменьшения порогового значения V_{offset} , необходимого для изменения резистивного состояния, с ростом t_P можно объяснить с точки зрения

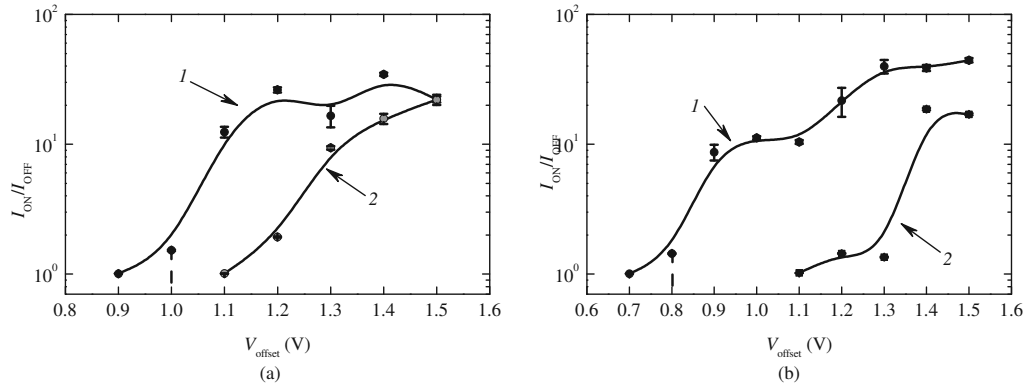


Рис. 4. Зависимости отношения I_{ON}/I_{OFF} от V_{offset} для случая переключения прямоугольными импульсами с наложением (1) и без наложения (2) шума. $\sigma = 0.2$ (1), 0 (2) В, $t_P = 10$ (a), 50 (b) мкс

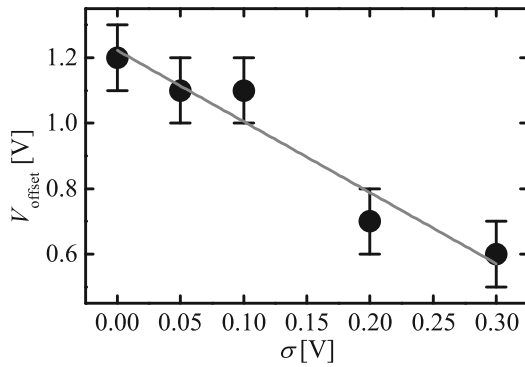


Рис. 5. Зависимость порогового значения V_{offset} , необходимого для переключения мемристора, от σ ; $t_P = 5$ мс

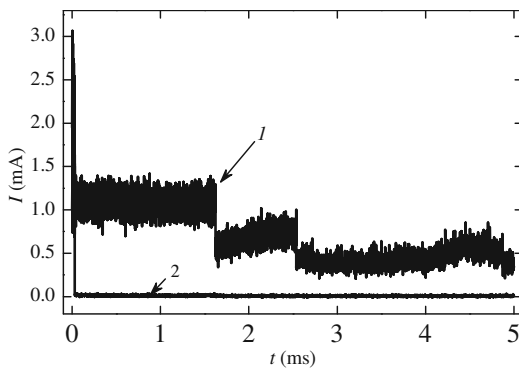


Рис. 6. Осциллограммы $I(t)$, демонстрирующие процесс перехода мемристора из HPC в промежуточные метастабильные состояния (включая процесс RESET), при подаче прямоугольных переключающих импульсов с наложением шума. $\sigma = 0.1$ (1), 0.3 (2), $V_{offset} = 1.0$ В, $t_P = 5$ мс

энергии, необходимой для изменения сопротивления мемристора (разрушения филамента):

$$E = \int_0^{t_P} I(t)V(t)dt, \quad (2)$$

где $V(t)$ — напряжение, приложенное к мемристор. Представим $V(t)$ в виде

$$V(t) = V_{offset} + G(t),$$

где $G(t)$ — случайный сигнал (шум). Пренебрегая нелинейностью ВАХ мемристора, с учетом закона Ома $I(t) = V(t)/R$, где R — сопротивление филамента, выражение (2) можно записать в виде

$$\begin{aligned} E &= \int_0^{t_P} \frac{V_{offset} + G(t)}{R} (V_{offset} + G(t)) dt = \\ &= \int_0^{t_P} \left(\frac{V_{offset}^2}{R} + \frac{2V_{offset}G(t)}{R} + \frac{G(t)^2}{R} \right) dt. \end{aligned} \quad (3)$$

Если $G(t)$ — гауссов шум, то второе слагаемое в подынтегральном выражении в (3) обращается в нуль, поскольку распределение Гаусса симметрично относительно $V = 0$ В. Остальные два слагаемых представляют собой вклады от постоянной и шумовой компонент переключающего импульса соответственно.

Далее, в соответствии с рис. 2b, можно разделить интервал интегрирования в (3) $[0, t_P]$ на две части: $[0, t_s]$ и $[t_s, t_P]$:

$$R = \begin{cases} R_{ON}, & 0 < t < t_s, \\ R_{OFF}, & t_s < t < t_P, \end{cases} \quad (4)$$

где R_{ON} и R_{OFF} — сопротивления филамента в НРС и ВРС соответственно. Полагая $R_{\text{ON}} \ll R_{\text{OFF}}$, интервал интегрирования в (3) можно принять равным $[0, t_s]$. Далее, полагая R_{ON} постоянным на интервале $[0, t_s]$, получаем

$$E \approx (V_{\text{offset}}^2 + \sigma^2) \frac{t_s}{R_{\text{ON}}}. \quad (5)$$

В проведенном эксперименте $V_{\text{offset}}^2 \gg \sigma^2$. Тем не менее эффект от добавления шума при относительно малых значениях σ был весьма заметен. Было установлено, что при увеличении значения σ требуются меньшие значения V_{offset} для изменения сопротивления мемристора (см. рис. 5).

При определенных значениях V_{offset} и σ в случае переключения прямоугольными импульсами с добавлением шума наблюдается переход мемристора в промежуточные метастабильные резистивные состояния (рис. 6, кривая 1). Эти состояния соответствуют области плавного процесса RESET на циклических ВАХ (см. рис. 2а). Необходимо отметить, что указанные выше промежуточные метастабильные состояния мемристора могут быть индуцированы самим шумовым сигналом. Ранее в [10] сообщалось о модификации метастабильных состояний мемристора внешним шумом, которая описывается в рамках концепции мультипликативного шума. В то же время при достаточно большой величине σ наблюдается переход мемристора непосредственно в ВРС с высокими значениями R_{OFF} , минуя все метастабильные состояния (рис. 6, кривая 2).

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты настоящего исследования демонстрируют, что добавление гауссова «белого» шума с определенными параметрами к прямоугольным импульсам напряжения, переключающим мемристор из НРС в ВРС, приводит к значительному уменьшению пороговой амплитуды прямоугольного импульса V_{offset} , необходимой для переключения, по сравнению с переключением прямоугольными импульсами без наложения шума. Кроме того, пороговое значение V_{offset} для перехода из НРС в ВРС уменьшается с увеличением интенсивности шума σ и длительности прямоугольного импульса t_p . Отношение $I_{\text{ON}}/I_{\text{OFF}}$ при фиксированных значениях V_{offset} в присутствии шума больше, чем в его отсутствие, и

возрастает с увеличением σ . При относительно малых значениях σ переключающие импульсы с наложением шума переводят мемристор в метастабильные промежуточные резистивные состояния между НРС и ВРС, связанные с областью плавного процесса RESET на ВАХ мемристора. Напротив, при относительно больших значениях σ мемристор переходит непосредственно в ВРС с относительно высоким и стабильным сопротивлением, минуя промежуточные состояния. Добавлением шума с определенными параметрами к прямоугольным переключающим импульсам может быть достигнуто необходимое (заданное) ВРС, минуя промежуточные состояния.

Результаты настоящего исследования могут быть применены при разработке инновационных протоколов переключения мемристоров.

Финансирование. Работа выполнена в рамках научной программы Национального центра физики и математики (проект «Искусственный интеллект и большие данные в технических, промышленных, природных и общественных системах»). Лабораторные макеты мемристоров для исследований изготовлены в Лаборатории мемристорной наноэлектроники, созданной в рамках Государственного задания FSWR-2022-0009 на создание новых лабораторий для электронной промышленности.

ЛИТЕРАТУРА

1. S. H. Lee, X. Zhu, and W. D. Lu, Nano Res. **13**, 1228 (2020).
2. D. B. Strukov, G. S. Snider, D. R. Stewart, and R. S. Williams, Nat. Mater. **80**, 453 (2008).
3. D. Ielmini, Semicond. Sci. Technol. **31**, 063002 (2016).
4. J. S. Lee, S. Lee, and T. W. Noh, Appl. Phys. Rev. **2**, 031303 (2015).
5. I. Riess, J. Electroceram. **39**, 61 (2017).
6. A. Sawa, Mater. Today **11**, 28 (2008).
7. Z. Wang, H. Wu, G. W. Burr et al., Nat. Rev. Mater. **5**, 173 (2020).
8. A. Stotland and M. di Ventra, Phys. Rev. E **85**, 011116 (2012).
9. H. A. Kramers, Physica (Utrecht) **7**, 284 (1940).

- 10.** D. O. Filatov, D. V. Vrzheschch, O. V. Tabakov et al., J. Stat. Mech. Theory Exp. 124026 (2019).
- 11.** A. N. Mikhaylov, D. V. Guseinov, A. I. Belov et al., Chaos, Solitons & Fractals **144**, 110723 (2021).
- 12.** M. A. Ryabova, D. O. Filatov, M. N. Koriashkina et al., J. Phys.: Conf. Ser. **1851**, 012003 (2021).
- 13.** N. V. Agudov, A. A. Dubkov, A. V. Safonov et al., Chaos, Solutions and Fractals **150**, 111131(2021).
- 14.** D. O. Filatov, M. N. Koryazhkina, A. S. Novikov et al., Chaos, Solitons, & Fractals **156**, 111810 (2022).
- 15.** M. N. Koryazhkina, D. O. Filatov, V. A. Shishmakova et al., Chaos, Solutions & Fractals **162**, 112459 (2022).
- 16.** G. A. Patterson, P. I. Fierens, and D. F. Grosz, Appl. Phys. Lett. **103**, 074102 (2013).
- 17.** V. Ntinis, A. Rubio, G. Ch. Sirakoulis et al., IEEE Trans. Circuits and Systems II **68**, 1378 (2021).
- 18.** S. Menzel, U. Bottger, M. Wimmer, and M. Salinga, Adv. Func. Mater. **25**, 6306 (2015).

ПЕРЕХОДЫ ЛИФШИЦА И УГЛОВЫЕ ДИАГРАММЫ ПРОВОДИМОСТИ В МЕТАЛЛАХ СО СЛОЖНЫМИ ПОВЕРХНОСТЯМИ ФЕРМИ

А.Я. Мальцев^{*}

Математический институт им. В.А. Стеклова Российской академии наук
119991, Москва, Россия

Поступила в редакцию 15 июня 2023 г.,
после переработки 15 июня 2023 г.
Принята к публикации 24 июня 2023 г.

Мы рассматриваем топологические переходы Лифшица и соответствующие им изменения гальваномагнитных свойств металла с точки зрения общей классификации открытых электронных траекторий, возникающих в магнитном поле на поверхностях Ферми произвольной сложности. Построение такой классификации составляет содержание задачи Новикова и основано на разделении незамкнутых электронных траекторий на топологически регулярные и хаотические траектории. Описание устойчивых топологически регулярных траекторий составляет при этом основу полной классификации незамкнутых траекторий на произвольных поверхностях Ферми и связано с особыми топологическими структурами на этих поверхностях. Используя эту классификацию, мы описываем здесь отличительные особенности изменений картины электронных траекторий при переходах Лифшица, а также изменений поведения проводимости в присутствии сильного магнитного поля. Как оказывается, использование такого подхода позволяет дать описание не только изменений, связанных с устойчивыми электронными траекториями, но и изменений общей картины диаграммы проводимости в сильных магнитных полях.

DOI: 10.31857/S0044451023110135

EDN: PKGFIU

а именно, изменение топологии поверхности Ферми при прохождении критических точек дисперсионного соотношения $\epsilon(\mathbf{p})$ (см. рис. 1).

1. ВВЕДЕНИЕ

В данной работе мы постараемся описать наиболее общую связь переходов Лифшица (см. [1, 2]), ведущих к изменению топологии поверхности Ферми, с угловыми диаграммами, описывающими поведение магнитопроводимости металла в сильных магнитных полях. Надо сказать, что в настоящее время топологическими переходами Лифшица часто называют весьма широкий круг явлений, связанных с топологическими свойствами поверхности Ферми и их изменениями, и само изучение многообразия таких явлений составляет интереснейшую и быстро развивающуюся область физики конденсированного состояния (см., например, [3, 4]).

Мы здесь, однако, будем рассматривать наиболее классическое определение переходов Лифшица [1],

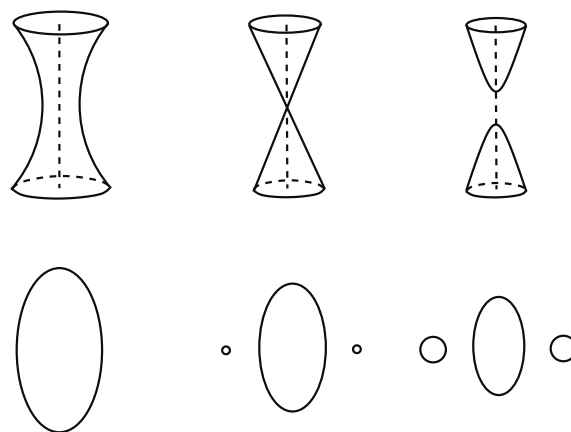


Рис. 1. Перестройка поверхности Ферми и появление новых компонент при прохождении критических точек соотношения $\epsilon(\mathbf{p})$ [1]

^{*} E-mail: maltsev@itp.ac.ru

Как хорошо известно, дисперсионное соотношение $\epsilon(\mathbf{p})$ можно рассматривать или как периодическую функцию в пространстве квазиимпульсов $\mathbb{R}^3$, или как гладкую функцию на трехмерном торе $\mathbb{T}^3$, получаемом из $\mathbb{R}^3$ факторизацией по векторам обратной решетки. Сингулярные точки функции $\epsilon(\mathbf{p})$ определяются условием $\nabla\epsilon(\mathbf{p}) = 0$, а соответствующие им уровни энергии, как известно, отвечают появлению особенностей Ван Хофа в электронной плотности состояний.

К сингулярностям функции $\epsilon(\mathbf{p})$ относятся точки ее локальных минимумов и максимумов, а также седловые особые точки (в предположении, что все особые точки $\epsilon(\mathbf{p})$ невырождены). Седловые точки функции в трехмерном пространстве, как известно, могут иметь индекс «1» или «2» в зависимости от того, представимо ли приращение функции вблизи этой точки в виде

$$d\epsilon(\mathbf{p}) = a^2 dp_1^2 + b^2 dp_2^2 - c^2 dp_3^2$$

или

$$d\epsilon(\mathbf{p}) = a^2 dp_1^2 - b^2 dp_2^2 - c^2 dp_3^2$$

в некоторой локальной евклидовой системе координат. Как хорошо известно из теории Морса, количество седловых особых точек обоих типов у функции на трехмерном торе всегда не меньше трех. В действительности, для реальных дисперсионных законов оно часто бывает больше, в частности, всякий раз, когда возникают поверхности Ферми рода больше 3. Здесь нам будут интересны именно седловые особые точки соотношения $\epsilon(\mathbf{p})$.

Как было показано в работе [1], прохождение уровня Ферми через критические точки $\epsilon(\mathbf{p})$ при определенном воздействии на образец (например, сильном внешнем давлении) приводит к особенностям в термодинамических величинах электронного газа в кристалле (переходам Лифшица), а также возможным резким изменениям в поведении магнитопроводимости в сильных магнитных полях. Последнее обстоятельство связано при этом с возможным существенным изменением геометрии траекторий системы

$$\dot{\mathbf{p}} = \frac{e}{c} [\mathbf{v}_{\text{gr}}(\mathbf{p}) \times \mathbf{B}] = \frac{e}{c} [\nabla\epsilon(\mathbf{p}) \times \mathbf{B}], \quad (1)$$

описывающей квазиклассическую динамику электронов во внешнем магнитном поле, на поверхности Ферми. Главным эффектом является при этом резкое изменение поведения магнитопроводимости благодаря появлению (или исчезновению) открытых траекторий системы (1) при топологических перестройках поверхности Ферми.

Важнейшая роль появления открытых траекторий системы (1) на поверхности Ферми при описании проводимости металлов в сильных магнитных полях была также впервые выявлена школой И.М. Лифшица (см. [2, 5–7]). При этом, поскольку траектории системы (1) задаются пересечениями поверхностей $\epsilon(\mathbf{p}) = \text{const}$ плоскостями, ортогональными магнитному полю, геометрия таких траекторий существенным образом определяется геометрией и топологией поверхности Ферми. В частности, огромное значение имеет вопрос, является ли поверхность Ферми ограниченной, или неограниченной в $\mathbf{p}$ -пространстве.

При этом, как было показано в работе [5], вклады замкнутых и открытых периодических траекторий в тензор проводимости существенно отличаются в пределе $\omega_B \tau \rightarrow \infty$ (т.е. в пределе сильных магнитных полей). В частности, при наличии лишь замкнутых траекторий на поверхности Ферми проводимость в плоскости, ортогональной $\mathbf{B}$, убывает во всех направлениях в указанном пределе. Асимптотическое поведение полного тензора проводимости может быть при этом представлено в виде

$$\sigma^{kl} \simeq \frac{ne^2\tau}{m^*} \begin{pmatrix} (\omega_B\tau)^{-2} & (\omega_B\tau)^{-1} & (\omega_B\tau)^{-1} \\ (\omega_B\tau)^{-1} & (\omega_B\tau)^{-2} & (\omega_B\tau)^{-1} \\ (\omega_B\tau)^{-1} & (\omega_B\tau)^{-1} & * \end{pmatrix} \quad (2)$$

($\omega_B \tau \rightarrow \infty$).

В то же время вклад открытых периодических траекторий в тензор проводимости является сильно анизотропным в плоскости, ортогональной $\mathbf{B}$, и может быть в главном порядке представлен в виде

$$\sigma^{kl} \simeq \frac{ne^2\tau}{m^*} \begin{pmatrix} (\omega_B\tau)^{-2} & (\omega_B\tau)^{-1} & (\omega_B\tau)^{-1} \\ (\omega_B\tau)^{-1} & * & * \\ (\omega_B\tau)^{-1} & * & * \end{pmatrix} \quad (3)$$

($\omega_B \tau \rightarrow \infty$).

В формулах (2), (3), как и везде далее, предполагается, что ось z направлена вдоль магнитного поля. В соотношении (3), кроме того, предполагается также, что направление оси x совпадает со средним направлением открытых траекторий в $\mathbf{p}$ -пространстве. Знак « $\simeq$ » в обеих формулах означает асимптотическое поведение, т.е. каждая из компонент содержит в действительности еще некоторый безразмерный множитель порядка 1. Величина ω_B играет роль электронной циклотронной частоты в металле, в то время как величина τ представляет время свободного пробега электронов. Величина m^* имеет смысл эффективной массы электрона в

кристалле. Соотношение $\omega_B \tau \gg 1$, как также хорошо известно, требует использования достаточно чистых монокристаллических образцов при очень низких температурах ($T \leq 1$ K) и достаточно сильных магнитных полей ($B \geq 1$ Тл).

Величина n обычно играет роль концентрации носителей тока в металле. В формулах (2), (3), однако, она пропорциональна также мере соответствующих траекторий (замкнутых или периодических) на поверхности Ферми. Последнее обстоятельство особенно важно в рассматриваемой нами ситуации, поскольку мера открытых траекторий может определяться близостью к точке перехода Лифшица ϵ_0 . Именно эта ситуация имеет место, например, в работе [1], где рассматривается появление и исчезновение периодических открытых траекторий на поверхности типа «гофрированного цилиндра». Для главного члена в асимптотическом поведении тензора проводимости при наличии открытых траекторий на поверхности Ферми в этой ситуации в работе [1] была предложена формула

$$\sigma^{kl} = \begin{pmatrix} \gamma^2 a_{xx} & \gamma a_{xy} & \gamma a_{xz} \\ \gamma a_{yx} & \gamma^2 a_{yy} + \beta^{1/2} b_{yy} & \gamma a_{yz} + \beta^{1/2} b_{yz} \\ \gamma a_{zx} & \gamma a_{zy} + \beta^{1/2} b_{zy} & a_{zz} \end{pmatrix} \quad (4)$$

($\omega_B \tau \rightarrow \infty$), где $\gamma = (\omega_B \tau)^{-1}$, $\beta = |(\epsilon_F - \epsilon_0)/\epsilon_F|$, величины a_{kl} представляют некоторые константы, а величины b_{kl} содержат слабую (логарифмическую) зависимость от β .

Как можно видеть, формула (4) позволяет не только наблюдать переход Лифшица в описываемой ситуации, но и определить близость к этому переходу при изменении параметров воздействия на образец.

В общей ситуации поверхность Ферми представляет собой произвольную 3-периодическую поверхность в $\mathbf{p}$ -пространстве (рис. 2) и задача описания траекторий системы (1) является довольно сложной. Впервые задача полной классификации открытых траекторий системы (1) была поставлена Новиковым в работе [8] и затем интенсивно исследовалась в его топологической школе (см. [9–16]). В результате исследования задачи Новикова был получен целый ряд глубоких топологических результатов, и к настоящему времени представлена полная классификация открытых траекторий системы (1) для произвольных периодических законов дисперсии $\epsilon(\mathbf{p})$. Следствия из топологических теорем, полученных при исследовании задачи Новикова, привели также к описанию целого ряда физических эффектов, связанных с поведением открытых траекто-

рий (1) и, кроме того, позволили дать полную классификацию возможных асимптотических режимов поведения проводимости в сильных магнитных полях для металлов со сколь угодно сложными поверхностями Ферми (см., например, [17–22]).

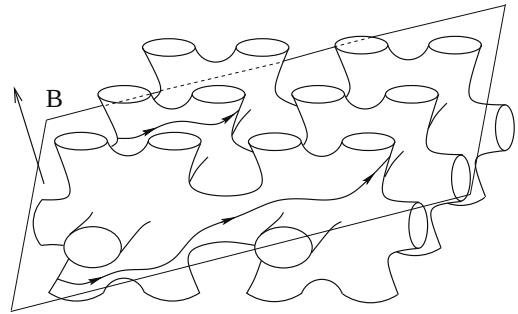


Рис. 2. Траектории системы (1) на периодической поверхности Ферми общего вида

Здесь нас будут интересовать изменения открытых траекторий системы (1) при переходах Лифшица, т.е. изменении топологии поверхности Ферми при прохождении особых точек дисперсионного соотношения $\epsilon(\mathbf{p})$. Мы будем предполагать при этом, что поверхность Ферми имеет самый общий вид, а при описании траекторий пользоваться общей классификацией, полученной при исследовании задачи Новикова. Для описания ситуации мы будем пользоваться угловыми диаграммами, задающими тип траекторий системы (1) на поверхности Ферми в зависимости от направления магнитного поля. Угловая диаграмма, таким образом, представляет собой единичную сферу S^2 , параметризующую направления $\mathbf{B}$ и определяющую тип траекторий на поверхности Ферми для каждого направления. Поскольку тип траекторий системы (1) определяет асимптотическое поведение тензора проводимости в пределе сильных магнитных полей, такие диаграммы естественно также называть диаграммами проводимости (магнитопроводимости) для заданной поверхности Ферми. Нас, главным образом, будут интересовать здесь изменения таких диаграмм, сопровождающие переходы Лифшица. Экспериментальное наблюдение изменений (резких скачков) в таких диаграммах может в общем случае служить одним из инструментов изучения переходов Лифшица в металлах со сложными поверхностями Ферми.

Здесь мы представим общие закономерности изменений диаграмм проводимости при прохождении особенностей соотношения $\epsilon(\mathbf{p})$, основываясь на общей теории таких диаграмм, построенной при ис-

следовании задачи Новикова. В следующем разделе мы приведем общую классификацию диаграмм, отвечающих различным поверхностям Ферми, и опишем их связь с угловыми диаграммами для всего дисперсионного соотношения $\epsilon(\mathbf{p})$. В разд. 3 мы приведем описание типичных изменений на угловых диаграммах, отвечающих топологическим переходам различных типов на поверхностях Ферми произвольной сложности.

2. ОБЩИЕ ФАКТЫ ОБ УГЛОВЫХ ДИАГРАММАХ ПРОВОДИМОСТИ МЕТАЛЛОВ

Основой для классификации открытых траекторий системы (1) является описание ее устойчивых открытых траекторий. Здесь мы называем открытые траектории (1) устойчивыми, если они не исчезают и сохраняют свою глобальную геометрию при малых вариациях параметров задачи, в частности, малых вариациях уровня ϵ_F и вращения направления $\mathbf{V}$. Как следует из результатов работ [9, 10, 12] устойчивые открытые траектории системы (1) обладают следующими замечательными свойствами.

1) Каждая устойчивая открытая траектория системы (1) лежит в прямой полосе конечной ширины в плоскости, ортогональной $\mathbf{V}$, и проходит ее насквозь (рис. 3).

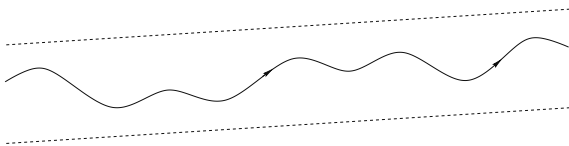


Рис. 3. Вид устойчивой открытой траектории системы (1) в плоскости, ортогональной $\mathbf{V}$ (схематично)

2) Среднее направление всех устойчивых открытых траекторий (1) при заданном направлении магнитного поля задается пересечением плоскости, ортогональной $\mathbf{V}$, и некоторой целочисленной (порожденной двумя векторами обратной решетки) плоскости Γ , направление которой неизменно при малых вариациях параметров задачи.

Свойство (1) устойчивых открытых траекторий проявляется непосредственно в поведении магнитопроводимости в сильных магнитных полях. А именно, здесь, как и в случае периодических открытых траекторий, наблюдается сильная анизотропия проводимости в плоскости, ортогональной $\mathbf{V}$, а главный член в асимптотике тензора проводимости также

задается формулой (3). Для специальных направлений $\mathbf{V}$ устойчивые открытые траектории (1) могут быть периодическими. В случае общего положения, однако, они являются квазипериодическими и не имеют периодов в $\mathbf{p}$ -пространстве. Направление максимального подавления проводимости принадлежит при этом соответствующей плоскости Γ , что делает ее экспериментально наблюдаемой [17, 19]. Целочисленная плоскость в $\mathbf{p}$ -пространстве может быть также определена как плоскость, ортогональная некоторому целочисленному направлению исходной кристаллической решетки. Плоскость Γ , таким образом, может быть определена некоторой несократимой целочисленной тройкой (m^1, m^2, m^3) . Числа (m^1, m^2, m^3) были определены в работе [17] как топологические числа, наблюдаемые в проводимости нормальных металлов.

Каждое семейство устойчивых открытых траекторий задается некоторой областью (зоной устойчивости) Ω на угловой диаграмме, отвечающей одним и тем же значениям (m^1, m^2, m^3) . В общем случае угловая диаграмма может содержать некоторое (конечное или бесконечное) число зон устойчивости Ω_α , отвечающих различным значениям $(m_\alpha^1, m_\alpha^2, m_\alpha^3)$. Наличие зон устойчивости и их расположение на единичной сфере $\mathbb{S}^2$ является важной составляющей угловой диаграммы проводимости металла в сильных магнитных полях.

Кроме устойчивых открытых траекторий системы (1) существуют также неустойчивые открытые траектории. К ним, прежде всего, могут относиться периодические траектории, например, рассмотренные выше. Периодические траектории являются, в некотором смысле, полуустойчивыми, а именно, они сохраняются при вращениях $\mathbf{V}$, ортогональных их среднему направлению, и разрушаются при всех других вращениях. Таким траекториям соответствуют одномерные дуги на угловой диаграмме, отмечающие наличие таких траекторий на поверхности Ферми при соответствующих направлениях $\mathbf{V}$. Совокупность соответствующих дуг на сфере $\mathbb{S}^2$ также является важной частью диаграммы магнитопроводимости металла.

Периодические открытые траектории, однако, не являются единственным типом неустойчивых открытых траекторий системы (1). А именно, существуют открытые траектории системы (1) значительно более сложной геометрии, которые являются неустойчивыми как по отношению к малым вращениям направления $\mathbf{V}$, так и малым вариациям уровня Ферми ϵ_F [11, 14, 15]. Такие траектории могут быть условно разделены на два основных типа, а

именно, траектории типа Царева и траектории типа Дынникова. Траектории типа Царева могут наблюдаться лишь при частично иррациональных направлениях $\mathbf{B}$, когда плоскость, ортогональная $\mathbf{B}$, содержит один (с точностью до пропорциональности) вектор обратной решетки. Напротив, траектории типа Дынникова могут возникать лишь для направлений $\mathbf{B}$ полной иррациональности (плоскость, ортогональная $\mathbf{B}$, не содержит векторов обратной решетки).

Неустойчивые траектории обоих типов обладают довольно сложным поведением на поверхности Ферми, которая в этом случае сама должна обладать достаточной сложностью. При этом, однако, поведение траекторий типа Царева в плоскостях, ортогональных $\mathbf{B}$, существенно проще поведения траекторий типа Дынникова. А именно, траектории типа Царева обладают асимптотическим направлением, одним и тем же во всех плоскостях, ортогональных $\mathbf{B}$, для заданного направления $\mathbf{B}$. Как следствие этого, вклад траекторий типа Царева в тензор проводимости также обладает сильной анизотропией в плоскости, ортогональной $\mathbf{B}$, и близок по форме к вкладу (3), хотя и отличается от него в некоторых деталях.

Траектории типа Дынникова обладают гораздо более сложным поведением в плоскостях, ортогональных $\mathbf{B}$, блуждая по ним довольно хаотическим образом (рис. 4). Среди особенностей вклада таких траекторий в тензор магнитопроводимости можно выделить подавление проводимости вдоль направления магнитного поля (см. [18]), а также появление дробных степеней параметра $\omega_B \tau$ в асимптотиках компонент тензора в пределе $\omega_B \tau \rightarrow \infty$ [18, 21]. Отметим здесь, что исследование появления и геометрических свойств траекторий типа Дынникова является активно развивающейся областью в настоящее время (см., например, [11, 13–15, 18, 20, 21, 23–41]).

Ввиду особой сложности геометрии траекторий типа Царева или Дынникова такие траектории принято называть хаотическими. Устойчивые открытые траектории системы (1), а также периодические траектории принято называть топологически регулярными.

Появление неустойчивых траекторий типа Царева или Дынникова на поверхности Ферми связано с особенно сложными угловыми диаграммами, которые мы опишем ниже. Расположение соответствующих направлений $\mathbf{B}$ на таких диаграммах является, возможно, наиболее интересной информацией о поверхности Ферми.

Перед описанием типов диаграмм, отвечающих фиксированным поверхностям Ферми, удобно дать

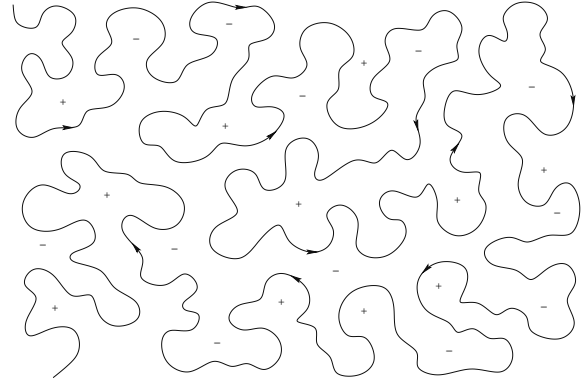


Рис. 4. Вид хаотической траектории Дынникова в плоскости, ортогональной $\mathbf{B}$ (схематично)

описание угловых диаграмм, отвечающих всему дисперсионному закону $\epsilon(\mathbf{p})$. Такие диаграммы были введены в работе [16] и основаны на важном свойстве открытых траекторий системы (1), а именно, тип открытых траекторий системы (1) при заданном направлении $\mathbf{B}$ одинаков для всех уровней энергии $\epsilon(\mathbf{p}) = \text{const}$, на которых они появляются. Более того, ситуация в общем случае может быть описана следующим образом [16].

Рассмотрим гладкую 3-периодическую функцию $\epsilon(\mathbf{p})$, значения которой лежат в интервале $[\epsilon_{\min}, \epsilon_{\max}]$. Рассмотрим некоторое фиксированное направление $\mathbf{B}$ и соответствующую ему систему (1). Будем считать для простоты, что направление $\mathbf{B}$ не является рациональным. Тогда можно сформулировать следующие утверждения.

1) Открытые траектории системы (1) возникают или в некотором замкнутом интервале энергий

$$\epsilon_{\min} < \epsilon_1(\mathbf{B}) \leq \epsilon(\mathbf{p}) \leq \epsilon_2(\mathbf{B}) < \epsilon_{\max}$$

или лишь на одном уровне энергии $\epsilon_0 = \epsilon_1(\mathbf{B}) = \epsilon_2(\mathbf{B})$.

2) В случае $\epsilon_1(\mathbf{B}) < \epsilon_2(\mathbf{B})$ все неособые открытые траектории в интервале $[\epsilon_1(\mathbf{B}), \epsilon_2(\mathbf{B})]$ лежат в прямых полосах конечной ширины в плоскостях, ортогональных $\mathbf{B}$, и проходят их насквозь (см. рис. 3). Все они имеют при этом одно и то же среднее направление, задаваемое пересечением плоскости, ортогональной $\mathbf{B}$, с некоторой целочисленной плоскостью Γ в $\mathbf{p}$ -пространстве.

3) Для направлений $\mathbf{B}$ общего положения величины $\epsilon_1(\mathbf{B})$ и $\epsilon_2(\mathbf{B})$ совпадают со значениями некоторых непрерывных функций $\tilde{\epsilon}_1(\mathbf{B})$ и $\tilde{\epsilon}_2(\mathbf{B})$, определенных всюду на $\mathbb{S}^2$. Однако для направлений $\mathbf{B}$, отвечающих появлению периодических открытых тра-

екторий, значения $\epsilon_1(\mathbf{B})$ и $\epsilon_2(\mathbf{B})$ имеют «скачки», при этом всегда имеют место неравенства

$$\epsilon_1(\mathbf{B}) \leq \tilde{\epsilon}_1(\mathbf{B}) \leq \tilde{\epsilon}_2(\mathbf{B}) \leq \epsilon_2(\mathbf{B}).$$

4) Свойство $\tilde{\epsilon}_1(\mathbf{B}) < \tilde{\epsilon}_2(\mathbf{B})$, а также целочисленная плоскость Γ устойчивы относительно малых вращений направления $\mathbf{B}$, так что каждая из плоскостей Γ_α отвечает определенной «зоне устойчивости» $\hat{\Omega}_\alpha$ в пространстве направлений $\mathbf{B}$.

Согласно [16], картина распределения зон устойчивости для произвольного дисперсионного закона $\epsilon(\mathbf{p})$ может отвечать лишь одной из двух ситуаций.

1) Вся единичная сфера является единственной зоной устойчивости $\hat{\Omega}$, отвечающей некоторой целочисленной плоскости Γ .

2) Угловая диаграмма содержит бесконечное число зон устойчивости, объединение которых всюду плотно на сфере S^2 (см., например, рис. 5).

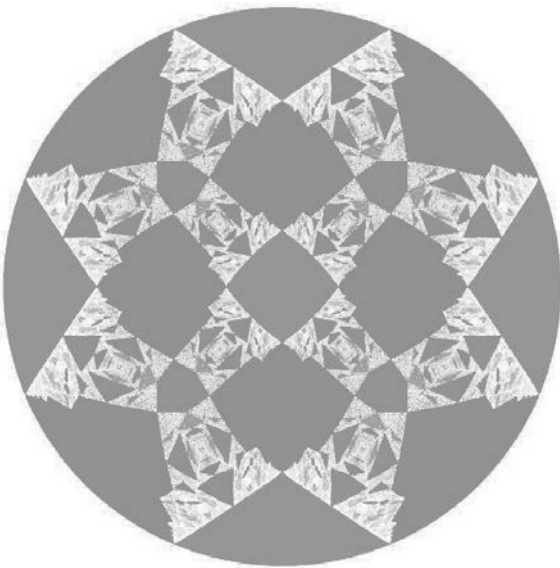


Рис. 5. Зоны устойчивости для дисперсионного соотношения $\epsilon(\mathbf{p}) = \cos p_x \cos p_y + \cos p_y \cos p_z + \cos p_z \cos p_x$ [40]

Случай (1), как правило, наблюдается для дисперсионных соотношений довольно специального вида, близких к дисперсионным соотношениям в квазиодномерных проводниках. Для подавляющего большинства реальных дисперсионных соотношений, однако, имеет место случай (2). Мы будем называть здесь дисперсионные соотношения, отвечающие случаю (1), дисперсионными соотношениями с простой угловой диаграммой. Аналогично, дисперсионные соотношения, отвечающие случаю (2), мы будем называть соотношениями со сложной угловой

диаграммой. Здесь нам, в первую очередь, будут интересны дисперсионные соотношения со сложными угловыми диаграммами.

Дополнение $\mathcal{M}$ к объединению зон устойчивости представляет собой довольно сложное множество фрактального типа на сфере S^2 . Согласно гипотезе Новикова [28], это множество имеет меру нуль и хаусдорфову размерность строго меньше 2. Первая часть гипотезы Новикова совсем недавно была доказана для дисперсионных соотношений, удовлетворяющих дополнительному условию $\epsilon(-\mathbf{p}) = \epsilon(\mathbf{p})$ (И.А. Дынников, П. Хьюберт, П. Меркат и А.С. Скрипченко, в процессе публикации). Вторая часть гипотезы подтверждается серьезными численными исследованиями, но пока не доказана строго.

Точки множества $\mathcal{M}$ представляют собой точки накопления бесконечного числа уменьшающихся зон устойчивости. При этом множество $\mathcal{M}$ может содержать специальные рациональные направления $\mathbf{B}$ (см. [42]), а также направления $\mathbf{B}$, отвечающие появлению траекторий типа Царева или Дынникова. Множество специальных рациональных направлений $\mathbf{B}$, однако, представляет собой лишь счетное подмножество множества $\mathcal{M}$, так что «почти все» точки множества $\mathcal{M}$ представляют, в действительности «хаотические» направления указанных двух типов. Значения функций $\tilde{\epsilon}_1(\mathbf{B})$ и $\tilde{\epsilon}_2(\mathbf{B})$ совпадают на множестве $\mathcal{M}$, а также на границах всех зон $\hat{\Omega}_\alpha$.

Нетрудно видеть, что на фиксированной поверхности Ферми при заданном направлении $\mathbf{B}$ возникают открытые траектории, только если уровень Ферми попадает в соответствующий интервал $[\epsilon_1(\mathbf{B}), \epsilon_2(\mathbf{B})]$. В частности, каждая зона устойчивости Ω_α на диаграмме проводимости является подобластью некоторой зоны $\hat{\Omega}_\alpha$, определенной для всего дисперсионного соотношения. Как правило, большая часть угловой диаграммы проводимости металла представляет при этом область, отвечающую наличию лишь замкнутых траекторий на поверхности Ферми.

Можно видеть также, что при определении зон Ω_α , а также направлений Царева и Дынникова для фиксированной поверхности Ферми, можно пользоваться функциями $\tilde{\epsilon}_1(\mathbf{B})$ и $\tilde{\epsilon}_2(\mathbf{B})$, в то время как для определения направлений, отвечающих появлению неустойчивых периодических траекторий, необходимо знать функции $\epsilon_1(\mathbf{B})$ и $\epsilon_2(\mathbf{B})$. Последнее обстоятельство проявляется, в частности, в некотором отличии в форме зон Ω_α от зон $\hat{\Omega}_\alpha$. А именно, множество направлений $\mathbf{B}$, отвечающее появлению открытых траекторий, связанных с зоной Ω_α , несколько больше самой зоны на угловой диаграмме.

ме и содержит также бесконечное множество отрезков, примыкающих к границе Ω_α и отвечающих появлению периодических траекторий на поверхности Ферми (рис. 6). Возникающие периодические траектории при этом можно считать устойчивыми для направлений $\mathbf{V}$ внутри Ω_α и неустойчивыми на дополнительных сегментах.

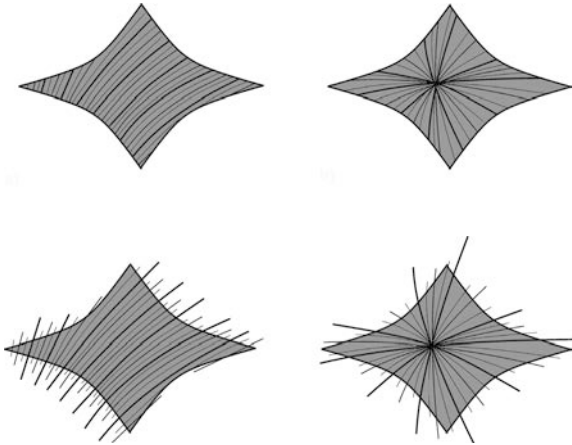


Рис. 6. Зоны $\hat{\Omega}_\alpha$ (вверху) и зоны Ω_α (внизу) с примыкающими сегментами, отвечающими появлению неустойчивых периодических траекторий на поверхности Ферми (схематично, указаны также сети направлений $\mathbf{V}$ внутри зон, отвечающие устойчивым периодическим траекториям)

Такое устройство зон Ω_α приводит, в действительности, к довольно сложному аналитическому поведению тензора проводимости вблизи их границ, что делает затруднительным определение формы этих зон в прямых измерениях проводимости (см., например, [43]). Вместе с тем, однако, существуют методы экспериментального определения точных математических границ зон Ω_α , что позволяет установить экспериментально их точную форму (см. [44]).

Зоны Ω_α представляют собой области с кусочно-гладкими границами на сфере (см., например, [16]). Кроме этого, нам неизвестны какие-либо ограничения на их форму. В частности, могут существовать несвязанные области устойчивости, отвечающие одним и тем же значениям (m^1, m^2, m^3) . Мы условимся здесь для простоты считать объединение таких областей одной несвязной зоной устойчивости на S^2 . В этом смысле каждая область Ω_α и диаметрально противоположная ей образуют одну и ту же зону устойчивости. Кроме того, зоны устойчивости могут также быть неодносвязными (см., например, [42]). Последнее, однако, имеет место для весьма специфических поверхностей Ферми, представ-

ляющих собой специальные математические примеры. Для реальных дисперсионных законов мы будем здесь предполагать, что все зоны Ω_α являются односвязными областями с кусочно-гладкими границами на S^2 .

Ниже мы приведем краткое описание различных типов угловых диаграмм проводимости в металлах, а также их изменений при изменении величины ϵ_F в интервале $[\epsilon_{\min}, \epsilon_{\max}]$ [45], которое нам понадобится в дальнейшем. Нам здесь будут прежде всего интересны диаграммы проводимости, отвечающие дисперсионным законам со сложными угловыми диаграммами, т.е. диаграммами, содержащими бесконечное число зон устойчивости $\hat{\Omega}_\alpha$.

Нетрудно видеть, что если значение ϵ_F достаточно близко к значению $\epsilon_{\min}$ или $\epsilon_{\max}$, поверхности Ферми представляют собой эллипсоиды малого размера, и открытые траектории системы (1) на них отсутствуют при любом направлении $\mathbf{V}$. Можно отметить также, что холловская проводимость имеет при этом электронный тип в первом случае и дырочный тип во втором. Соответствующие угловые диаграммы проводимости можно называть диаграммами нулевого типа и обозначать их символом 0_- или 0_+ в зависимости от знака холловской проводимости. В общем случае, для фиксированного дисперсионного соотношения $\epsilon(\mathbf{p})$ можно выделить значения $\epsilon_1^{A'}$ и $\epsilon_2^{A'}$, такие что угловым диаграммам типа 0_- и 0_+ отвечают ситуации

$$\epsilon_F \in (\epsilon_{\min}, \epsilon_1^{A'}) \quad \text{и} \quad \epsilon_F \in (\epsilon_2^{A'}, \epsilon_{\max})$$

соответственно.

Для дисперсионных законов общего положения можно также выделить значения ϵ_1^A и ϵ_2^A , такие что ситуации

$$\epsilon_F \in (\epsilon_1^{A'}, \epsilon_1^A) \quad \text{и} \quad \epsilon_F \in (\epsilon_2^A, \epsilon_2^{A'})$$

соответствуют диаграммам проводимости, содержащим лишь одномерные дуги, отвечающие появлению неустойчивых периодических траекторий на поверхности Ферми. Диаграммы такого типа можно обозначать символами 1_- и 1_+ в зависимости от типа холловской проводимости, наблюдаемой при направлениях $\mathbf{V}$, отвечающих наличию лишь замкнутых траекторий на поверхности Ферми.

Интервал $(\epsilon_1^A, \epsilon_2^A)$ отвечает диаграммам проводимости, содержащим зоны устойчивости Ω_α . Можно сказать, что такие диаграммы обладают достаточным уровнем сложности, и именно они, главным образом, будут нам интересны здесь. Для дисперсионных законов общего положения, имеющих сложные

угловые диаграммы (с бесконечным числом зон $\hat{\Omega}_\alpha$), однако, этот интервал естественно разделить на три интервала (см. [45]):

$$\epsilon_1^A < \epsilon_1^B < \epsilon_2^B < \epsilon_2^A$$

Диаграммы проводимости, отвечающие ситуациям

$$\epsilon_F \in (\epsilon_1^A, \epsilon_1^B) \quad \text{и} \quad \epsilon_F \in (\epsilon_2^B, \epsilon_2^A),$$

можно назвать диаграммами типа A_- и A_+ соответственно. Эти диаграммы отличаются тем, что во всех областях направлений $\mathbf{B}$, отвечающих наличию лишь замкнутых траекторий на поверхности Ферми, холловская проводимость имеет, соответственно, электронный и дырочный тип.

Диаграммы проводимости, отвечающие ситуации

$$\epsilon_F \in (\epsilon_1^B, \epsilon_2^B),$$

можно назвать диаграммами типа B . Эти диаграммы отличаются тем, что в пространстве направлений $\mathbf{B}$ (на единичной сфере $\mathbb{S}^2$) среди областей, отвечающих наличию лишь замкнутых траекторий на поверхности Ферми, имеются как области электронной холловской проводимости, так и области дырочной холловской проводимости.

В действительности, между диаграммами типа A и диаграммами типа B существуют еще два важных различия (см. [45]).

1) Диаграммы типа A общего положения содержат конечное число зон Ω_α , в то время как диаграммы типа B общего положения содержат бесконечное число зон устойчивости.

2) Диаграммы типа A общего положения не содержат направлений $\mathbf{B}$, отвечающих появлению траекторий Царева или Дынникова, в то время как диаграммы типа B общего положения содержат такие направления.

На рис. 7 (схематически) представлена возможная эволюция диаграммы проводимости в описываемой нами ситуации при изменении ϵ_F от значения ϵ_1^A до ϵ_2^A .

Интервал $(\epsilon_1^B, \epsilon_2^B)$ отличается также тем, что в нем появляются зоны устойчивости с более сложной границей, чем в интервалах $(\epsilon_1^A, \epsilon_1^B)$ и $(\epsilon_2^B, \epsilon_2^A)$, а именно, здесь появляются зоны, часть границы которых примыкает к областям электронной холловской проводимости, а часть к областям дырочной холловской проводимости.

Отметим здесь также, что участки границ Ω_α , примыкающие к областям электронной холловской проводимости, определяются соотношением $\tilde{\epsilon}_1(\mathbf{B}) = \epsilon_F$, а участки границ, примыкающие к

областям дырочной холловской проводимости, соотношением $\tilde{\epsilon}_2(\mathbf{B}) = \epsilon_F$.

Приведенная выше картина отвечает дисперсионным законам общего положения с угловой диаграммой, содержащей бесконечное число зон $\hat{\Omega}_\alpha$. Эта картина, в действительности, может иметь следующие вырождения.

1) $\epsilon_1^{A'} = \epsilon_1^A$ или $\epsilon_2^A = \epsilon_2^{A'}$, так что соответствующий интервал $(\epsilon_1^{A'}, \epsilon_1^A)$ или $(\epsilon_2^A, \epsilon_2^{A'})$ стягивается в точку. В приведенной картине в этом случае отсутствуют диаграммы типа 1_- или 1_+ и диаграммы типа 0_- и A_- или A_+ и 0_+ (или и те и другие) сразу переходят друг в друга. Такие вырождения нередко возникают для дисперсионных соотношений, обладающих достаточно высокой симметрией (например, кубической).

2) Вырождение $\epsilon_1^B = \epsilon_2^B$. В этом случае в приведенной картине отсутствуют диаграммы типа B , а диаграмма, возникающая для уровня $\epsilon_1^B = \epsilon_2^B$, совпадает с угловой диаграммой для всего дисперсионного закона. Соответствующие дисперсионные законы образуют весьма специальный класс (бесконечной коразмерности в пространстве периодических $\epsilon(\mathbf{p})$), и мы не будем рассматривать их здесь. Подчеркнем здесь только, что мы в данном случае имеем в виду дисперсионные соотношения, диаграммы которых остаются сложными (содержат бесконечное число зон устойчивости), в том числе в точке вырождения. Кроме таких случаев, существуют также деформации дисперсионных соотношений, при которых интервал $(\epsilon_1^B, \epsilon_2^B)$ бесконечно сужается, а соответствующие угловые диаграммы упрощаются и превращаются в диаграммы с одной зоной устойчивости в точке вырождения. Такие вырождения, в некотором смысле, отвечают границе между дисперсионными соотношениями двух описанных выше типов и наблюдаются в гораздо более общей ситуации.

Хотя нам прежде всего будут интересны здесь дисперсионные соотношения с бесконечным числом зон устойчивости, приведем здесь также типичную картину изменения диаграммы проводимости для соотношений, отвечающих наличию всего одной зоны $\hat{\Omega}$. Как и ранее, мы будем предполагать здесь, что все зоны устойчивости являются односвязными, что соответствует реалистичным законам дисперсии, возникающим в реальных проводниках.

Как и в предыдущем случае, для дисперсионных законов общего положения здесь также можно ввести набор реперных точек

$$\epsilon_{\min} < \hat{\epsilon}_1^{A'} < \hat{\epsilon}_1^A < \hat{\epsilon}_1^B < \hat{\epsilon}_2^B < \hat{\epsilon}_2^A < \hat{\epsilon}_2^{A'} < \epsilon_{\max},$$

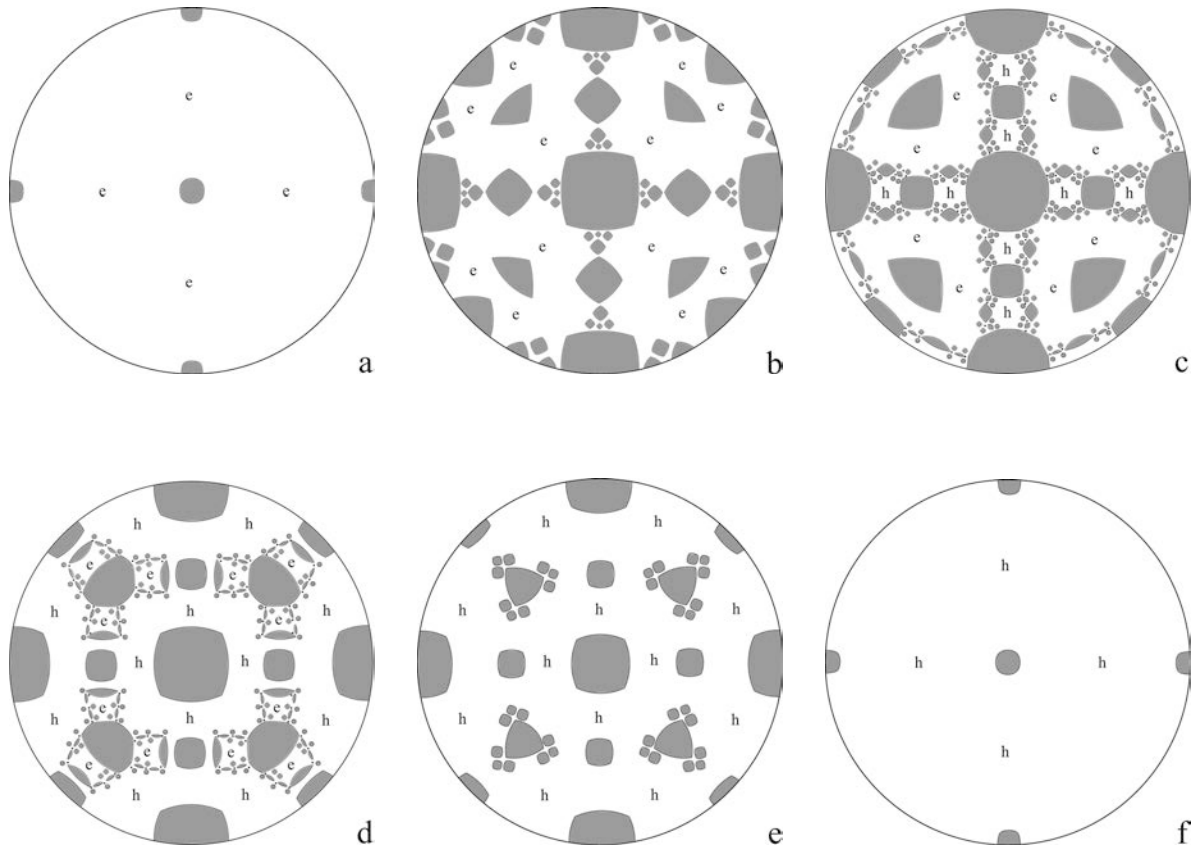


Рис. 7. Возможная эволюция диаграммы проводимости при изменении ϵ_F от значения ϵ_1^A до ϵ_2^A и переходе через значения ϵ_1^B и ϵ_2^B . Схематически показаны зоны Ω_α и области электронной (e) и дырочной (h) холловской проводимости при наличии лишь замкнутых траекторий на поверхности Ферми. Можно специально выделить диаграммы типа A_- (a и b), диаграммы типа B (c и d) и диаграммы типа A_+ (e и f)

разделяющих интервалы с диаграммами различных типов.

Интервалы $[\epsilon_{\min}, \hat{\epsilon}_1^{A'})$ и $(\hat{\epsilon}_2^{A'}, \epsilon_{\max}]$, а также $(\hat{\epsilon}_1^{A'}, \hat{\epsilon}_1^A)$ и $(\hat{\epsilon}_2^A, \hat{\epsilon}_2^{A'})$, как и ранее, отвечают здесь диаграммам типа 0_- , 0_+ , 1_- и 1_+ соответственно.

Интервалы $(\hat{\epsilon}_1^A, \hat{\epsilon}_1^B)$ и $(\hat{\epsilon}_2^B, \hat{\epsilon}_2^A)$ отвечают диаграммам A_- и A_+ соответственно. Единственная особенность здесь состоит в том, что на таких диаграммах присутствует лишь одна зона устойчивости, отвечающая единственному набору (m^1, m^2, m^3) . Область, не принадлежащая зоне устойчивости, отвечает электронной холловской проводимости для диаграмм типа A_- , и дырочной для диаграмм типа A_+ .

Диаграмму, возникающую в интервале $(\hat{\epsilon}_1^B, \hat{\epsilon}_2^B)$, мы назовем здесь диаграммой типа $\hat{B}$. Она содержит единственную зону устойчивости, покрывающую всю единичную сферу S^2 .

Как и в предыдущем случае, приведенная выше картина допускает вырождения. В частности, ситу-

ации $\hat{\epsilon}_1^{A'} = \hat{\epsilon}_1^A$ и $\hat{\epsilon}_2^A = \hat{\epsilon}_2^{A'}$ отвечают здесь тем же типам вырождения, что и в случае сложных угловых диаграмм. Вырождение $\hat{\epsilon}_1^B = \hat{\epsilon}_2^B$ отвечает «границе» между дисперсионными соотношениями со сложными угловыми диаграммами и соотношениями с простыми угловыми диаграммами.

3. ПЕРЕХОДЫ ЛИФШИЦА И ОБЩИЕ ПРИНЦИПЫ ИЗМЕНЕНИЯ ДИАГРАММ ПРОВОДИМОСТИ

Изменение картины открытых траекторий системы (1) может быть довольно простым и наглядным для достаточно простых поверхностей Ферми. Ярким примером может служить классическая перестройка, рассмотренная в работе [1] (см. рис. 1), где компактная поверхность Ферми приобретает форму гофрированного цилиндра. Легко видеть, что открытые траектории возникают при этом лишь при

направлениях $\mathbf{B}$, ортогональных оси цилиндра, и являются периодическими. В общем случае, однако, описание открытых траекторий на поверхности Ферми является довольно сложной задачей и часто требует серьезных численных исследований (см., например, [14, 26, 40]). В данной работе мы постараемся описать наиболее общие особенности изменения угловых диаграмм при переходах Лифшица, основываясь на общих топологических результатах, полученных при исследовании задачи Новикова. Как мы увидим ниже, такие особенности могут приводить при этом к ряду весьма специальных режимов в поведении проводимости, наблюдаемых экспериментально и свойственных именно ситуациям, близким к топологическим переходам.

Естественным показателем топологической сложности поверхности Ферми является ее ранг, а именно, количество независимых направлений, в которых поверхность простирается в $\mathbf{p}$ -пространстве. Легко видеть, что ранг поверхности Ферми может принимать значения 0, 1, 2 и 3 (рис. 8).

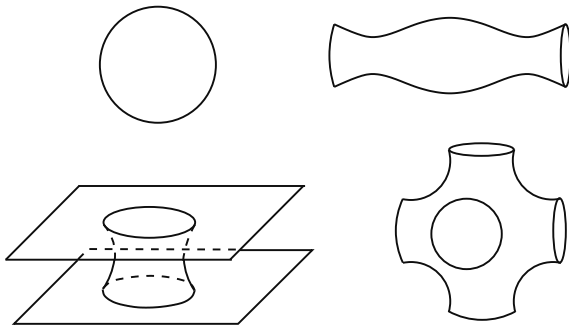


Рис. 8. Примеры поверхностей Ферми ранга 0, 1, 2 и 3

Кроме того, поскольку поверхность Ферми можно также рассматривать как компактную поверхность в трехмерном торе, она также обладает топологическим родом g , который может принимать значения 0, 1, 2, 3, 4, ... и т. д. (рис. 9). По топологическим соображениям ранг поверхности Ферми не может превышать ее рода. Важным является также и то, что, помимо топологической сложности, поверхность Ферми может иметь весьма сложную геометрическую форму в $\mathbf{p}$ -пространстве, что тоже оказывает существенное влияние на форму траекторий системы (1).

Прохождение особых точек соотношения $\epsilon(\mathbf{p})$ при увеличении энергии ϵ_F меняет топологию поверхности Ферми. Легко видеть, что прохождение минимумов и максимумов $\epsilon(\mathbf{p})$ приводит к появлению и исчезновению (малых) компонент поверхно-

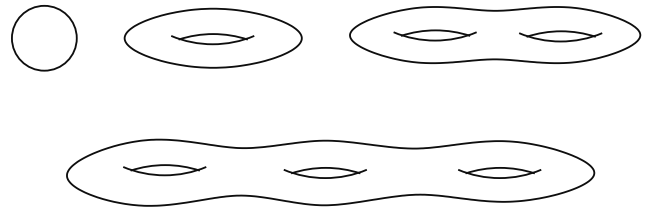


Рис. 9. Топологические поверхности рода 0, 1, 2 и 3

сти Ферми, в то время как прохождение седловых особых точек приводит к слиянию или распаду отдельных компонент, или изменению их рода. Если говорить о перестройке связной компоненты поверхности Ферми, то прохождение седловой особой точки индекса 1 повышает ее род на единицу, в то время как прохождение особой точки индекса 2 уменьшает ее род на единицу. В более общем случае прохождение особой точки индекса 1 может также приводить к слиянию отдельных компонент, в то время как прохождение точки индекса 2 — к распаду одной компоненты на две.

Согласно теории Морса, гладкая функция $\epsilon(\mathbf{p})$ на торе $\mathbb{T}^3$ имеет не менее трех седловых особых точек как индекса 1, так и индекса 2 (и, конечно, не менее одного минимума и максимума). Весьма часто, однако, число седловых особых точек $\epsilon(\mathbf{p})$ превышает приведенные нижние оценки, а род поверхности Ферми бывает равен 4 и более.

Конечно, изменение топологии поверхности Ферми нередко дает очевидные указания на возможность появления на ней незамкнутых траекторий системы (1). Особенно это относится к изменению ранга поверхности Ферми, а также к появлению периодических открытых траекторий. Обычно в этих случаях поверхности Ферми имеют достаточно простую форму и отвечают достаточно простым угловым диаграммам проводимости.

Нам здесь будет интересно рассмотреть ситуацию, когда переходы Лифшица происходят на достаточно сложных поверхностях Ферми, отвечающих также достаточно сложным диаграммам проводимости. Поскольку структура таких диаграмм формируется главным образом картиной зон устойчивости на них, нам прежде всего интересно будет здесь проследить за изменениями этой картины при топологических переходах.

Выше мы описали эволюцию картины зон устойчивости на сложной диаграмме проводимости, начиная с момента их возникновения на диаграмме до их полного исчезновения (см. рис. 7). При возрастании значения ϵ_F диаграмма меняется монотонно, при

этом область, отвечающая наличию лишь замкнутых траекторий на поверхности Ферми и электронной холловской проводимости, монотонно уменьшается (до своего исчезновения), а аналогичная область, отвечающая дырочной холловской проводимости, монотонно увеличивается (с момента своего появления). В частности, участки границ Ω_α , примыкающие к первой области, движутся наружу зон устойчивости, а участки, примыкающие ко второй области, вовнутрь зон. Как мы уже сказали выше, участки первого типа определяются соотношением $\tilde{\epsilon}_1(\mathbf{B}) = \epsilon_F$, а участки второго типа — соотношением $\tilde{\epsilon}_2(\mathbf{B}) = \epsilon_F$.

В интервалах энергии, не содержащих перестроек поверхности Ферми, эволюция диаграммы проводимости является непрерывной. Вместе с тем, как было указано в работе [16], функции $\tilde{\epsilon}_1(\mathbf{B})$ и $\tilde{\epsilon}_2(\mathbf{B})$ могут быть локально постоянными в некоторых областях на единичной сфере. Данное явление связано именно с топологическими перестройками поверхности S_F , а значения этих функций на таких «плато» совпадают при этом с энергиями, при которых наблюдаются соответствующие перестройки (переходы Лифшица). Как можно видеть, картина зон устойчивости может в этом случае меняться «скачком» в некоторой области на S^2 , отвечающей «плато» функции $\tilde{\epsilon}_1(\mathbf{B})$ или $\tilde{\epsilon}_2(\mathbf{B})$.

Мы постараемся рассмотреть здесь наиболее подробно возможные изменения диаграммы проводимости при переходах Лифшица, включая описание режимов поведения тензора $\sigma^{kl}(\mathbf{B})$, отвечающих таким изменениям. Как мы уже сказали выше, мы начнем со случаев, отвечающих появлению или исчезновению устойчивых открытых траекторий на поверхности Ферми.

В связи с исследованием открытых траекторий системы (1) нам будут интересны переходы Лифшица, связанные с прохождением седловых особых точек соотношения $\epsilon(\mathbf{p})$ при изменении величины ϵ_F . На рис. 10 приведены перестройки поверхности Ферми при прохождении особых точек индекса 1 (вверху) и 2 (внизу) с увеличением энергии Ферми. Перестройки на рис. 10 выглядят как взаимно обратные, мы должны помнить, однако, что в обоих случаях при возрастании ϵ_F происходит увеличение области $\epsilon(\mathbf{p}) < \epsilon_F$ и уменьшение области $\epsilon(\mathbf{p}) > \epsilon_F$.

Изменение картины открытых траекторий на поверхности Ферми при увеличении ϵ_F может быть связано с двумя процессами в плоскостях, ортогональных $\mathbf{B}$, а именно, образование открытых траекторий из замкнутых траекторий электронного типа и распад открытых траекторий на замкнутые тра-

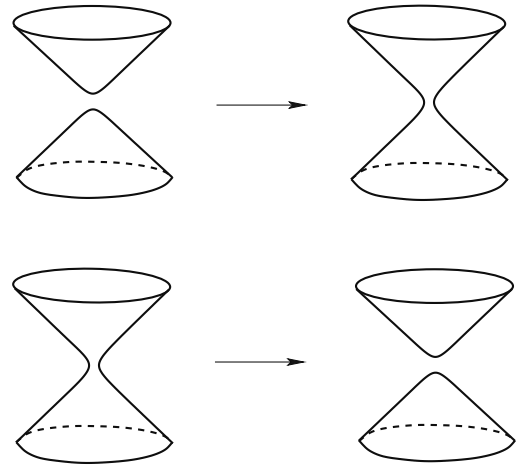


Рис. 10. Перестройки поверхности Ферми при прохождении седловых особых точек $\epsilon(\mathbf{p})$ индекса 1 (вверху) и индекса 2 (внизу)

ектории дырочного типа (рис. 11). Аналогично, при уменьшении значения ϵ_F эти процессы идут в обратном направлении.

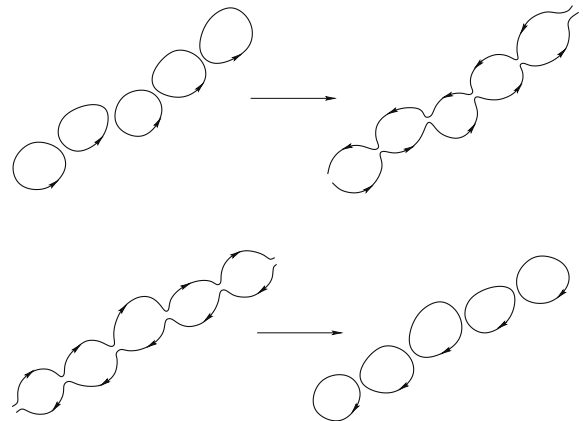


Рис. 11. Образование открытых траекторий и их распад при увеличении значения ϵ_F

Нетрудно видеть, что при направлениях $\mathbf{B}$, близких к оси конуса

$$a^2 dp_1^2 + b^2 dp_2^2 - c^2 dp_3^2 = 0 \quad (5)$$

(в соответствующей данной точке системе координат) или, соответственно,

$$a^2 dp_1^2 - b^2 dp_2^2 - c^2 dp_3^2 = 0 \quad (6)$$

никаких изменений картины открытых траекторий системы (1) произойти не может. Уравнение (5) или (6) выделяет, таким образом, две эллипсоидальные

области на единичной сфере, в которых заведомо не происходит изменений диаграммы проводимости (в нашем смысле) при прохождении соответствующих особых точек. Изменение картины открытых траекторий на поверхности Ферми может, таким образом, происходить лишь в кольцевой области, разделяющей противоположные эллипсоидальные области на S^2 (рис. 12). Можно отметить также, что в случае наблюдения резких изменений вдоль границы этой области (или ее части) нетрудно определить параметры соответствующей особой точки (точнее, величины b/a и c/a).

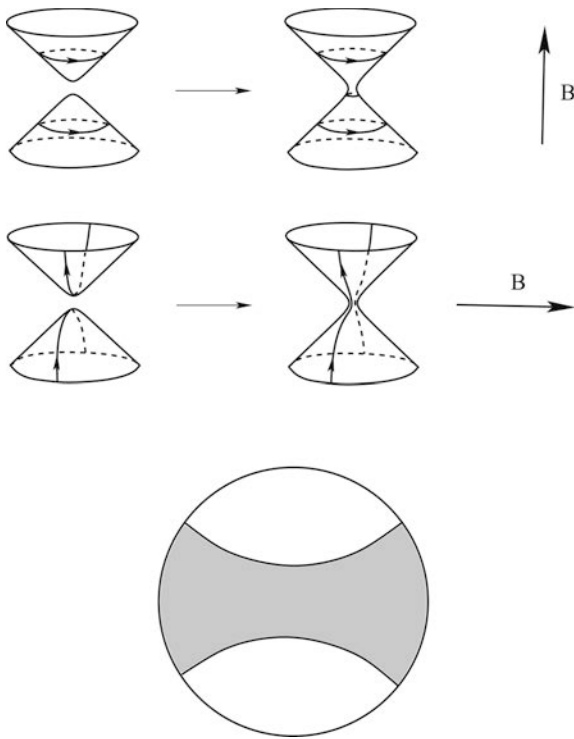


Рис. 12. Изменение траекторий при прохождении особой точки при различных направлениях $\mathbf{V}$ и область возможных изменений диаграммы проводимости (закрашена)

Для дальнейшего рассмотрения нам понадобится краткое описание структуры системы (1) на поверхности Ферми при наличии на ней устойчивых открытых траекторий (см. [9, 12, 16]). Дадим здесь это описание, используя модельную поверхность Ферми.

Рассмотрим в $\mathbf{p}$ -пространстве периодическое семейство целочисленных плоскостей, соединенных цилиндрами (рис. 13). Как и ранее, мы называем плоскость в $\mathbf{p}$ -пространстве целочисленной, если она порождена двумя векторами обратной решетки.

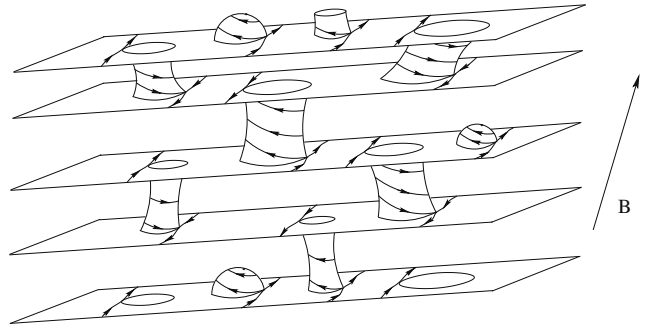


Рис. 13. Модельная поверхность Ферми, несущая устойчивые открытые траектории системы (1)

Мы предполагаем, что рассматриваемая поверхность является периодической с периодами, равными векторам обратной решетки. Кроме того, мы предполагаем, что все плоскости разделены на четные и нечетные, так что четные плоскости переходят в четные, а нечетные — в нечетные при сдвиге на любой период.

Нетрудно видеть, что при направлениях $\mathbf{V}$, почти ортогональных направлению плоскостей, на цилиндрах, соединяющих плоскости, возникнут замкнутые траектории, отделяющие плоскости друг от друга (см. рис. 13). На разделенных плоскостях при этом возникают устойчивые открытые траектории системы (1), среднее направление которых задается пересечением плоскости, ортогональной $\mathbf{V}$, и целочисленным направлением построенных нами плоскостей. Носители открытых траекторий представляют собой при этом (периодически деформированные) плоскости с отверстиями, образующимися после удаления замкнутых траекторий (рис. 14). Как также нетрудно видеть, направления пробегания по траекториям на четных и нечетных плоскостях противоположны друг другу.

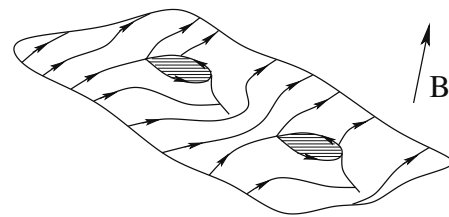


Рис. 14. Носитель устойчивых открытых траекторий системы (1) на поверхности Ферми

Приведенная выше картина устойчива относительно малых вращений направления $\mathbf{V}$ и сохраняется до тех пор, пока на цилиндрах, соединяющих

целочисленные плоскости, присутствуют замкнутые траектории, разделяющие эти плоскости. Соответствующая зона устойчивости Ω , очевидно, тем больше, чем выше и уже цилиндры, соединяющие плоскости, и наоборот, мала для широких цилиндров малой высоты. Можно отметить также, что исчезновение цилиндра замкнутых траекторий электронного типа отвечает участкам границы Ω , примыкающим к областям дырочной холловской проводимости, в то время как исчезновение цилиндра замкнутых траекторий дырочного типа отвечает участкам границы, примыкающим к областям электронной холловской проводимости.

Представленная картина является топологической и геометрически может выглядеть гораздо сложнее. В частности, носители открытых траекторий могут быть деформированы гораздо сильнее, а соединяющие их цилиндры могут иметь весьма малую высоту и довольно сложную форму. Тем не менее, описанное топологическое представление поверхности Ферми возникает всегда, когда на ней присутствуют устойчивые открытые траектории системы (1) [9, 12, 16]. Такое представление при этом не является единственным для заданной поверхности Ферми, в частности, в разных зонах устойчивости возникают разные представления одной и той же поверхности.

Дадим теперь описание возможных изменений картины зон устойчивости при прохождении седловой точки индекса 1 (см. рис. 10), используя приведенную выше структуру. Рассмотрим сначала случай, когда перестройка поверхности Ферми приводит к образованию устойчивых открытых траекторий (см. рис. 11) при некотором направлении $\mathbf{B}$. Используя описанную выше структуру, мы покажем здесь, что зоны устойчивости Ω_α , возникающие в результате такой перестройки, имеют в некотором смысле особенную форму, а также отличаются специфическим вкладом в тензор проводимости в пределе $B \rightarrow \infty$.

Поскольку появление открытых траекторий происходит благодаря перестройке поверхности Ферми, все такие траектории должны проходить через узкий перешеек, появляющийся после прохода седловой особой точки (рис. 15). Это значит, в частности, что цикл c , изображенный на рис. 15, должен проходить как через носитель открытых траекторий, пробегаемых в одном направлении, так и через носитель открытых траекторий, пробегаемых в противоположном направлении. Отсюда следует тогда, что он также проходит от одного основания цилиндра замкнутых траекторий, разделяющих эти но-

сители, до другого его основания. Можно видеть, таким образом, что высота хотя бы одного цилиндра замкнутых траекторий, соединяющих два носителя открытых траекторий, очень мала и стремится к нулю при приближении к точке топологического перехода. Кроме того, этот цилиндр имеет седловую особую точку на каждом из своих оснований, которые примыкают к двум разным носителям открытых траекторий. Нетрудно показать при этом, что такие точки должны лежать на разных перешейках в $\mathbf{p}$ -пространстве, а сам цилиндр, таким образом, проходит через оба этих перешейка. Легко видеть тогда, что довольно малые вращения направления $\mathbf{B}$, кроме ортогональных отрезку, соединяющему указанные перешейки, приведут к исчезновению указанного цилиндра замкнутых траекторий и, таким образом, к выходу за пределы зоны Ω_α . Можно видеть, таким образом, что образовавшаяся в результате перестройки зона устойчивости должна быть очень узкой областью на сфере S^2 (рис. 16).

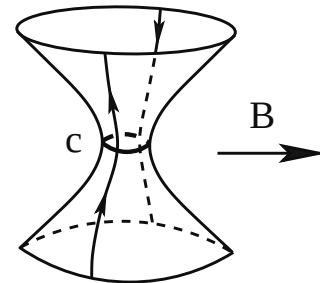


Рис. 15. Перешеек, образующийся после топологической перестройки, и цикл, пересекающий возникающие открытые траектории

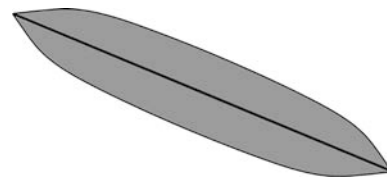


Рис. 16. Зона устойчивости, образующаяся в результате прохождения особой точки индекса 1 при возрастании значения ϵ_F (схематично)

При приближении к точке перехода ширина области Ω_α стремится к нулю, так что Ω_α стремится в пределе к одномерной дуге на единичной сфере (см. рис. 16). Легко видеть, что эта дуга представляет собой отрезок большого круга, ортогональ-

ного некоторому целочисленному направлению в $\mathbf{p}$ -пространстве (а именно, вектору, соединяющему два рассматривавшихся выше перешейка). В точках данного отрезка, таким образом, плоскость, ортогональная $\mathbf{B}$, всегда содержит некоторый фиксированный вектор обратной решетки. Нетрудно показать также, что ширина области Ω_α стремится к нулю по закону $\sim \sqrt{(\epsilon_F - \epsilon_0)/\epsilon_F}$ при приближении к точке перехода.

Прохождение седловой точки индекса 1 может приводить к возникновению как конечного, так и бесконечного числа узких зон устойчивости на угловой диаграмме. В последнем случае, как можно видеть, мы должны в результате ожидать появления угловой диаграммы типа B , описанного выше.

Можно также отметить, что суммарная площадь зон устойчивости, возникающих как результат топологической перестройки, стремится к нулю при приближении к точке перехода. Как следствие этого, прохождение особой точки индекса 1 не вызывает скачкообразного уменьшения площади областей, отвечающих холловской проводимости электронного типа (и наличию лишь замкнутых траекторий на поверхности Ферми).

Образование зон устойчивости при прохождении особой точки индекса 1 может происходить на диаграммах типа 0_- , 1_- , A_- и B . В первом случае, как нетрудно видеть, это приводит к изменению типа 0_- сразу на тип A_- . Как мы уже говорили, такие вырождения являются типичными для дисперсионных соотношений достаточно высокой симметрии и появления сразу нескольких особых точек одного типа на одном уровне энергии.

Для описания поведения тензора проводимости в рассматриваемой ситуации нам необходимо также обсудить меру открытых траекторий, возникающих на поверхности Ферми. В действительности, для направлений $\mathbf{B}$ общего положения (максимальной иррациональности) мера таких траекторий обладает малостью по параметру близости к точке перехода. Чтобы это показать, рассмотрим поверхность Ферми непосредственно перед прохождением (одной или сразу нескольких) особых точек индекса 1. Для направлений $\mathbf{B}$ общего положения на ней в этом случае присутствуют только замкнутые траектории, а сама поверхность Ферми представляет набор конечного числа (неэквивалентных) цилиндров замкнутых траекторий, разделенных сингулярными траекториями (рис. 17).

Вблизи точки перехода при $\epsilon_F > \epsilon_0$ на поверхности Ферми появляются тонкие перешейки, соединяющие различные ее части. Рассматривая такие пе-

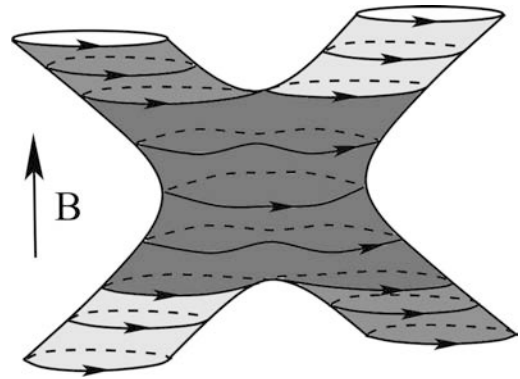


Рис. 17. Пример поверхности Ферми, состоящей из цилиндров замкнутых траекторий системы (1)

решейки на каждом из цилиндров замкнутых траекторий, можно видеть, что при сильном уменьшении их диаметра большая часть замкнутых траекторий не претерпевает никаких изменений (рис. 18). В результате, в пределе $\epsilon_F \rightarrow \epsilon_0$ почти все траектории для таких направлений $\mathbf{B}$ остаются замкнутыми. Нетрудно видеть также, что доля изменившихся при этом траекторий системы (1) на каждом из цилиндров пропорциональна отношению ширины перешейков к высоте цилиндра, т.е. величине $\sqrt{(\epsilon_F - \epsilon_0)/\epsilon_F}$. Соответствующий множитель возникает при этом и для вклада (3) открытых траекторий в тензор проводимости в пределе $\omega_B \tau \rightarrow \infty$ (а также множитель, содержащий слабую логарифмическую зависимость от $(\epsilon_F - \epsilon_0)/\epsilon_F$ из-за близости траекторий к особым точкам системы (1) в узких перешейках).

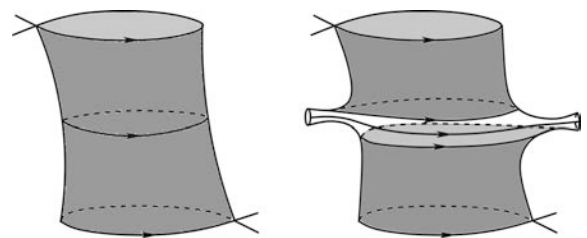


Рис. 18. Тонкие перешейки, примыкающие к цилиндру замкнутых траекторий конечной высоты и перестройка траекторий на поверхности Ферми (закрашены цилиндры сохраняющихся траекторий)

Приведенное выше рассуждение, однако, нуждается в одном важном дополнении. А именно, кроме близости к точке топологического перехода, в рассматриваемой ситуации важную роль может играть также близость направления $\mathbf{B}$ к направлению

ям, отвечающим появлению периодических открытых траекторий на поверхности Ферми еще до точки перехода. Такие траектории могут существовать по обе стороны от топологического перехода, занимая при этом конечную площадь на поверхности Ферми. Для направлений $\mathbf{B}$, близких к таким направлениям, по крайней мере, некоторые из описанных выше цилиндров замкнутых траекторий (см. рис. 17) имеют малую высоту и большие «поперечные» размеры в $\mathbf{p}$ -пространстве. В этом случае отношение диаметра перешейков к высоте цилиндров может оставаться конечным.

Близость направлений $\mathbf{B}$ общего положения к описанным выше направлениям в нашем случае может быть обусловлена специфической геометрией зон устойчивости (см. рис. 16). Это относится, в первую очередь, к отрезку, на который стягивается зона в пределе $\epsilon_F \rightarrow \epsilon_0$ и который может быть множеством направлений, отвечающих появлению периодических траекторий еще до точки перехода. Как мы уже видели выше, ширина области Ω_α также пропорциональна при этом величине $\sqrt{(\epsilon_F - \epsilon_0)/\epsilon_F}$ и то же самое можно сказать в этом случае и о высоте части цилиндров замкнутых траекторий, возникающих для направлений $\mathbf{B} \in \Omega_\alpha$ до топологического перехода (когда открытых траекторий для этих направлений еще нет). Как следствие этого, мера открытых траекторий на поверхности Ферми в зоне Ω_α может оставаться конечной вблизи перехода. При этом, однако, возникающие устойчивые открытые траектории обладают специфической геометрией. А именно, они ограничены прямыми полосами довольно большой ширины и повторяют геометрию периодических траекторий на малых масштабах (рис. 19).

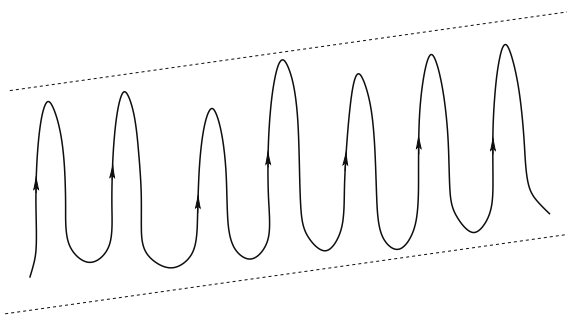


Рис. 19. Устойчивые открытые траектории, возникающие для направлений $\mathbf{B}$, близких к направлениям появления периодических траекторий (схематично)

Для описанных направлений $\mathbf{B}$ можно ввести функцию $\mu(\mathbf{B})$, определяющую отношение минимальной ширины полос, содержащих открытые траектории, к размеру зоны Бриллюэна. Вклад открытых траекторий в проводимость при $\omega_B \tau \gg 1$ при этом различен в интервалах $1 \ll \omega_B \tau \leq \mu(\mathbf{B})$ и $\omega_B \tau \gg \mu(\mathbf{B})$. В первом случае этот вклад может быть приближен формулой (3), при условии, что направление оси x совпадает с направлением периодических открытых траекторий. Во втором случае направление оси x должно совпадать со средним направлением устойчивых открытых траекторий в $\mathbf{p}$ -пространстве, а суммарный вклад таких траекторий в тензор проводимости можно представить в виде

$$\sigma^{kl} \simeq \frac{n e^2 \tau}{m^*} \begin{pmatrix} \mu^2 (\omega_B \tau)^{-2} & (\omega_B \tau)^{-1} & \mu (\omega_B \tau)^{-1} \\ (\omega_B \tau)^{-1} & \mu^{-2} & \mu^{-1} \\ \mu (\omega_B \tau)^{-1} & \mu^{-1} & * \end{pmatrix} \quad (7)$$

($\omega_B \tau \rightarrow \infty$).

Функция $\mu(\mathbf{B})$ обладает сильной зависимостью от направления $\mathbf{B}$ и обращается в бесконечность для направлений, отвечающих появлению периодических траекторий, существующих по обе стороны от перехода.

Отдельного упоминания заслуживают также зоны Ω_α , обладающие дополнительной (вращательной) симметрией и появляющиеся в результате возникновения сразу нескольких особых точек индекса 1 на одном уровне ϵ_0 . Размеры таких зон стремятся к нулю по всем направлениям при приближении к точке перехода, а мера открытых траекторий на поверхности Ферми при $\mathbf{B} \in \Omega_\alpha$ пропорциональна $\sqrt{(\epsilon_F - \epsilon_0)/\epsilon_F}$.

Симметричные зоны устойчивости, однако, обладают еще одной особенностью. А именно, вектор (m^1, m^2, m^3) для таких зон совпадает с направлением, проходящим через центр зоны (см. [16]), и для данного направления $\mathbf{B}$ открытые траектории отсутствуют на поверхности Ферми. Для направлений $\mathbf{B}$, лежащих в симметричной зоне малых размеров, устойчивые открытые траектории лежат в прямых полосах большой ширины и обладают довольно сложным поведением на малых масштабах (рис. 20).

Для описания вклада в проводимость открытых траекторий в симметричных зонах устойчивости, возникающих при переходах Лифшица, также естественно рассмотреть интервалы $1 \ll \omega_B \tau \leq \mu(\mathbf{B})$ и $\omega_B \tau \gg \mu(\mathbf{B})$ для функции $\mu(\mathbf{B})$, имеющей тот же смысл, что и выше. В первом интервале поведение проводимости более сложное (возможно появ-

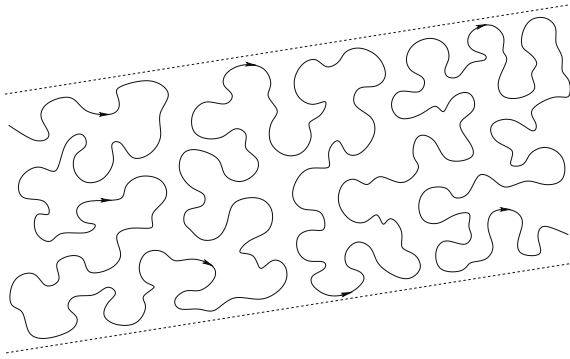


Рис. 20. Устойчивые открытые траектории, возникающие для направлений $\mathbf{B}$, лежащих в симметричной зоне устойчивости малых размеров

ление промежуточных дробных степеней $\omega_B \tau$), при этом общий вклад таких траекторий в тензор проводимости содержит также малый множитель порядка $\sqrt{(\epsilon_F - \epsilon_0)/\epsilon_F}$. Во втором интервале вклад открытых траекторий в проводимость аналогичен вкладу (7), также умноженному на величину порядка $\sqrt{(\epsilon_F - \epsilon_0)/\epsilon_F}$. При этом вероятно, что наблюдение также слабой логарифмической зависимости от $(\epsilon_F - \epsilon_0)/\epsilon_F$, обусловленной близостью к особым точкам соотношения $\epsilon(\mathbf{p})$, здесь несколько усложнено с экспериментальной точки зрения.

Надо сказать, что проводимость в области появления малых зон устойчивости, возникающих в результате переходов Лифшица, в целом имеет довольно сложное поведение, а исследование геометрии таких зон, возможно, удобнее проводить с помощью методов, отличающихся от методов прямых измерений проводимости (см., например, [44]). Вместе с тем, появление таких зон играет весьма важную роль при изменении структуры общей диаграммы проводимости, особенно в случае появления сложных диаграмм типа B .

Рассмотрим теперь вторую возможную ситуацию, а именно, исчезновение устойчивых открытых траекторий системы (1) при прохождении особой точки индекса 1 (см. рис. 11). В этой ситуации речь будет идти об исчезновении зоны устойчивости или ее части. Соответствующие изменения, очевидно, могут происходить лишь на диаграммах типа A_- , B и A_+ .

Как мы уже видели, распад устойчивых открытых траекторий системы (1) становится возможным, когда носители таких траекторий перестают быть отделенными друг от друга и появляется возможность «перескоков» между такими носителями. Таким образом, топологическая перестройка поверх-

ности Ферми приводит к распаду устойчивых открытых траекторий, если в результате перестройки образуется новый цилиндр, соединяющий два носителя и дающий возможность «перескоков» между ними при заданном направлении $\mathbf{B}$. Это именно та ситуация, которая приводит к образованию плато в значениях функций $\tilde{\epsilon}_1(\mathbf{B})$ и $\tilde{\epsilon}_2(\mathbf{B})$ (в данном случае $\tilde{\epsilon}_2(\mathbf{B})$) (см. [16]), что, в свою очередь, должно приводить к скачкообразному изменению диаграмм проводимости, рассматриваемых нами здесь.

Как мы уже отмечали, изменение диаграммы проводимости при рассматриваемой нами перестройке может происходить лишь в специальной кольцевой области (см. рис. 12). При изменении рассматриваемого типа при этом можно наблюдать мгновенное исчезновение зон конечных размеров (или их частей) в момент топологического перехода. Кроме того, мера открытых траекторий на поверхности Ферми здесь также остается конечной вплоть до момента перехода и мгновенно обращается в нуль (для направлений $\mathbf{B}$ общего положения) при перестройке поверхности.

Вместе с тем, близость к переходу Лифшица оказывает свое влияние на специфику траекторий системы (1), равно как и на поведение тензора проводимости, также и в описываемой ситуации. В данном случае оно выражается в появлении очень длинных замкнутых траекторий системы (1) на поверхности Ферми при направлениях $\mathbf{B}$ общего положения, лежащих в исчезнувших зонах устойчивости или их исчезнувших частях (рис. 21). Средняя длина таких траекторий стремится к бесконечности вблизи перехода и уменьшается при удалении от него. Кроме того, как мы уже отмечали выше, значения функций $\epsilon_1(\mathbf{B})$ и $\epsilon_2(\mathbf{B})$ отличаются от значений $\tilde{\epsilon}_1(\mathbf{B})$ и $\tilde{\epsilon}_2(\mathbf{B})$ для направлений $\mathbf{B}$, отвечающих появлению периодических открытых траекторий. Как следствие этого, периодические траектории системы (1) на поверхности Ферми не исчезают сразу в момент перехода, а сохраняются еще некоторое время. В результате, область исчезнувшей зоны устойчивости (или ее исчезнувшей части) покрыта сетью одномерных дуг, отвечающих наличию периодических траекторий на поверхности Ферми. Сеть соответствующих дуг уплотняется при приближении к топологическому переходу и становится бесконечно плотной в момент перехода.

Описанные особенности траекторий (1) вблизи перехода Лифшица приводят также к достаточно сложному поведению тензора проводимости в сильных магнитных полях. Соответствующее поведение $\sigma^{kl}(\mathbf{B})$ было описано в работе [43], где оно возникало

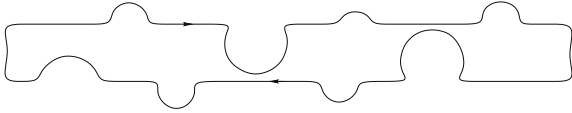


Рис. 21. Длинные замкнутые траектории, возникающие на поверхности Ферми вблизи топологического перехода (схематично)

в очень узких областях вблизи границ зон устойчивости Ω_α на диаграммах проводимости. Здесь, однако, такое поведение возникает в довольно больших областях, а именно, на месте исчезнувших зон Ω_α или их частей. В таких областях для направлений $\mathbf{B}$ общего положения естественно ввести (приближенную) функцию $\lambda(\mathbf{B})$, определяющую отношение среднего размера длинных замкнутых траекторий к размерам зоны Бриллюэна. Кроме того, при рассмотрении проводимости в этих областях естественно сохранять систему координат, отвечающую исчезнувшим открытым траекториям, а именно, выбирая среднее направление бывших открытых траекторий в $\mathbf{p}$ -пространстве в качестве оси x .

Естественным следствием геометрии траекторий в рассматриваемых нами областях является то, что их вклад в проводимость проявляется как вклад замкнутых траекторий при гораздо более сильном условии $\omega_B \tau \gg \lambda(\mathbf{B})$, в то время как в интервале $1 \ll \omega_B \tau \leq \lambda(\mathbf{B})$ их вклад скорее отвечает вкладу открытых траекторий. Однако и в пределе $\omega_B \tau \gg \lambda(\mathbf{B})$ вклад возникающих замкнутых траекторий сохраняет анизотропию в плоскости, ортогональной $\mathbf{B}$.

Кроме того, можно видеть, что длинные замкнутые траектории формируются из открытых траекторий, расположенных на двух разных носителях. Для дисперсионных соотношений, удовлетворяющих условию $\epsilon(\mathbf{p}) = \epsilon(-\mathbf{p})$ (и поверхностей Ферми не слишком большого рода), из этого в действительности следует соотношение $\langle v_{gr}^z \rangle \rightarrow 0$ при $\lambda(\mathbf{B}) \rightarrow \infty$ для среднего по траектории значения групповой скорости электрона вдоль направления магнитного поля. Как следствие этого, вклад таких траекторий в проводимость вдоль магнитного поля в действительности стремится к нулю в пределе $\omega_B \tau \gg \lambda(\mathbf{B}) \gg 1$. В последнем такой вклад схож со вкладом в проводимость неустойчивых траекторий Дынникова в пределе $\omega_B \tau \gg 1$.

В целом, суммарный вклад длинных замкнутых траекторий в симметричную s^{kl} и антисимметричную a^{kl} части тензора проводимости в пределе

$\omega_B \tau \gg \lambda(\mathbf{B})$ может быть представлен в виде [43]

$$s^{kl}(B) \simeq \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma^{zz}(\lambda) \end{pmatrix} + \frac{ne^2\tau}{m^*} \begin{pmatrix} (\omega_B \tau)^{-2} & \lambda(\omega_B \tau)^{-2} & \lambda(\omega_B \tau)^{-2} \\ \lambda(\omega_B \tau)^{-2} & \lambda^2(\omega_B \tau)^{-2} & \lambda^2(\omega_B \tau)^{-2} \\ \lambda(\omega_B \tau)^{-2} & \lambda^2(\omega_B \tau)^{-2} & \lambda^2(\omega_B \tau)^{-2} \end{pmatrix}$$

(где $\sigma^{zz}(\lambda) \rightarrow 0$ при $\lambda \rightarrow \infty$),

$$a^{kl}(B) \simeq \frac{ne^2\tau}{m^*} \begin{pmatrix} 0 & (\omega_B \tau)^{-1} & (\omega_B \tau)^{-1} \\ (\omega_B \tau)^{-1} & 0 & (\omega_B \tau)^{-1} \\ (\omega_B \tau)^{-1} & (\omega_B \tau)^{-1} & 0 \end{pmatrix}.$$

Надо сказать, что условие $\omega_B \tau \gg \lambda(\mathbf{B})$ может быть довольно сильным, и во многих случаях экспериментально может наблюдаться некоторый переходный режим между режимом (3) и описанной выше зависимостью. Отметим также, что к описанному выше вкладу надо в общем случае добавить еще вклад (2) от «обычных» замкнутых траекторий, которые тоже присутствуют на поверхности Ферми в описанной ситуации.

Величина $\lambda(\mathbf{B})$ обращается в бесконечность в точке топологического перехода. Для фиксированного направления $\mathbf{B}$ общего положения ее поведение при приближении к ϵ_0 может быть (приблизительно) описано зависимостью

$$\lambda \sim \sqrt{\epsilon_F / |\epsilon_F - \epsilon_0|}.$$

При этом зависимость λ от направления $\mathbf{B}$ является довольно сложной, в частности, λ обращается в бесконечность на (сохранившихся) дугах, отвечающих появлению периодических траекторий (1). В целом, исчезающие зоны устойчивости (или их части) могут быть названы областями сложного поведения проводимости в сильных магнитных полях.

В действительности, оба описанных эффекта (возникновение и исчезновение зон устойчивости) могут наблюдаться одновременно (в разных частях угловой диаграммы) при прохождении седловой особой точки индекса 1. На рис. 22 приведен пример одной из таких перестроек поверхности Ферми. Нетрудно видеть, что до перестройки угловая диаграмма является довольно простой (типа A_-) и содержит одну зону устойчивости (с диаметрально противоположной ей). После перестройки происходит исчезновение части зоны устойчивости и замена ее зоной сложного поведения проводимости. Кро-

ме того, происходит образование множества маленьких зон, отделяющих область электронной холловской проводимости от области дырочной холловской проводимости, возникающей на диаграмме. Можно показать, что в непосредственной близости к топологическому переходу цепи маленьких зон устойчивости «прижимаются» к зонам сложного поведения проводимости, в то время как при удалении от перехода они сдвигаются к «экватору». В целом, диаграмма проводимости после перехода имеет тип B и должна в случае общего положения содержать также направления $\mathbf{B}$, отвечающие появлению неустойчивых траекторий типа Царева или Дынникова.

Отметим здесь, что прохождение особых точек при увеличении значения ϵ_F может вызывать скачкообразные изменения диаграмм проводимости, однако, сохраняя общее направление их эволюции, представленное на рис. 7. Как следствие этого, исчезновение зоны устойчивости или ее части приводит в этой ситуации к скачкообразному увеличению площади, отвечающей дырочной холловской проводимости, при наличии лишь замкнутых траекторий на поверхности Ферми. При этом площадь области, отвечающей электронной холловской проводимости (и наличие лишь замкнутых траекторий на поверхности Ферми), непосредственно вблизи перехода остается неизменной. Можно видеть, таким образом, что если описанный эффект (исчезновение устойчивых открытых траекторий при прохождении особой точки индекса 1) имеет место для диаграммы типа A_- , тип диаграммы меняется на тип B . Из тех же соображений можно заключить, что наблюдение описанного эффекта на диаграммах типа B не меняет типа диаграммы. Наблюдение описанного эффекта на диаграмме типа A_+ сохраняет тип диаграммы, или меняет его на тип 1_+ .

В связи со сказанным выше нам хотелось бы отметить здесь еще одно важное обстоятельство. А именно, диаграммы типа B являются диаграммами общего положения и должны, вообще говоря, наблюдаться при исследовании достаточно богатых семейств поверхностей Ферми достаточно сложной формы. Вместе с тем, они пока не обнаружены экспериментально. То же самое верно также и для неустойчивых траекторий типа Царева или Дынникова, которые должны сопутствовать таким диаграммам. Одной из причин этого, на наш взгляд, может являться довольно малая величина интервала $(\epsilon_1^B, \epsilon_2^B)$ и, соответственно, малая вероятность попадания в него значения ϵ_F для реальных дисперсионных соотношений. В этой связи можно ожидать, что использование переходов Лифшица может дать

хорошие возможности для наблюдения таких диаграмм, а также нетривиальных режимов поведения проводимости, отвечающих появлению траекторий Царева или Дынникова на поверхности Ферми.

В целом, рассмотренные нами эффекты могут производить изменения на диаграммах проводимости перечисленных ниже типов со следующими возможными изменениями типа диаграммы:

$$\begin{aligned} 0_- &\rightarrow A_-, \\ 1_- &\rightarrow A_-, \\ A_- &\rightarrow \{A_-, B\}, \\ B &\rightarrow B, \\ A_+ &\rightarrow \{1_+, A_+\}. \end{aligned}$$

Описанные выше эффекты отвечают прохождению седловой особой точки индекса 1 в «прямом» направлении, а именно, при возрастании энергии Ферми ϵ_F . Конечно, в результате внешнего воздействия переходы Лифшица могут совершаться как в «прямом» так и в «обратном» направлениях. Более того, внешнее воздействие не обязательно просто изменяет уровень Ферми, но производит в общем случае изменение всего дисперсионного соотношения $\epsilon(\mathbf{p})$. Очевидно, в общем случае топология перестройки поверхности Ферми определяется, в действительности, изменениями соотношения $\epsilon(\mathbf{p})$ вблизи соответствующей особой точки. Естественно, тем не менее, при этом сохранить термины прохождение особой точки в прямом или обратном направлениях, исходя из совпадения топологии соответствующего перехода с топологией перехода при возрастании или убывании ϵ_F .

Считая изменение соотношения $\epsilon(\mathbf{p})$ непрерывным, в достаточно узкой окрестности топологического перехода влиянием общего изменения $\epsilon(\mathbf{p})$ можно пренебречь и считать, что главные изменения в картине зон устойчивости вызваны именно перестройкой поверхности Ферми. Для описания соответствующих изменений на угловой диаграмме при этом можно пользоваться картиной, полученной при рассмотрении, приведенном выше. Как мы уже сказали, приведенная выше картина относится к прохождению особой точки индекса 1 в прямом направлении. В общем случае нас здесь интересует аналогичное описание для прохождения точки индекса 1 в обратном направлении, а также прохождения точки индекса 2 в прямом и обратном направлениях.

Прохождение особой точки индекса 1 в обратном направлении, естественно, приводит к эффектам, обратным описанным выше. А именно, изменение картины устойчивых открытых траекторий

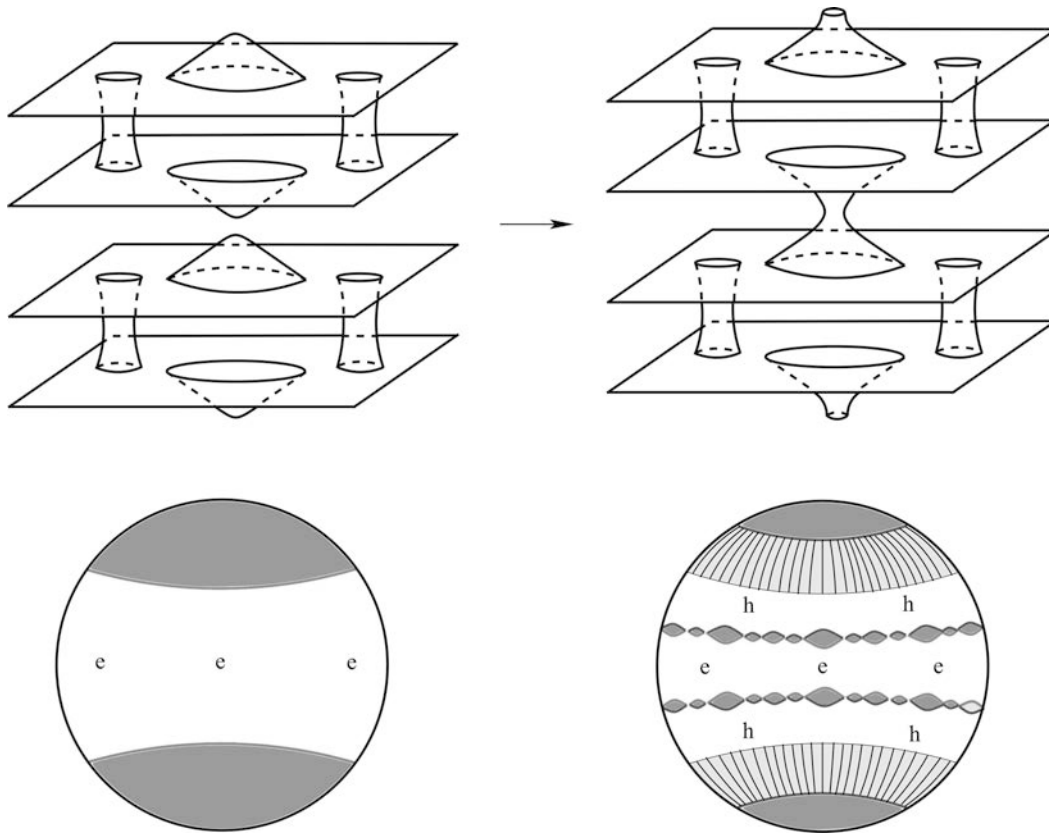


Рис. 22. Пример прохождения седловой особой точки индекса 1 и соответствующего изменения угловой диаграммы проводимости (схематично, показаны изменение картины зон устойчивости и образование области сложного поведения проводимости)

при прохождении седловой точки индекса 1 в обратном направлении может производить изменения на диаграммах проводимости перечисленных ниже типов со следующими возможными изменениями типа диаграммы:

$$\begin{aligned} A_- &\rightarrow \{0_-, 1_-, A_-\} \\ B &\rightarrow \{A_-, B\} \\ A_+ &\rightarrow A_+ \\ 1_+ &\rightarrow A_+. \end{aligned}$$

При этом картина зон устойчивости на диаграмме проводимости может претерпевать следующие специфические для этого случая изменения.

1) Уменьшение размеров некоторого (конечного или бесконечного) числа зон устойчивости и их исчезновение непосредственно в точке топологического перехода. Изменение может происходить на диаграммах типа A_- , B и A_+ .

2) Образование областей сложного поведения проводимости конечного размера в области дыроч-

ной холловской проводимости при приближении к топологическому переходу и их превращение в зоны устойчивости в точке перехода (или присоединение их к уже существующим зонам).

Прохождение седловой особой точки индекса 2 в прямом направлении, в действительности, аналогично прохождению особой точки индекса 1 в обратном направлении, однако, с заменой областей электронной холловской проводимости на области дырочной холловской проводимости и наоборот. Таким образом, изменение картины устойчивых открытых траекторий при прохождении седловой особой точки индекса 2 в прямом направлении может производить изменения на диаграммах проводимости перечисленных ниже типов со следующими возможными изменениями типа диаграммы:

$$\begin{aligned} 1_- &\rightarrow A_- \\ A_- &\rightarrow A_- \\ B &\rightarrow \{A_+, B\} \\ A_+ &\rightarrow \{0_+, 1_+, A_+\}. \end{aligned}$$

При этом картина зон устойчивости на диаграмме проводимости может претерпевать следующие специфические изменения.

1) Уменьшение размеров некоторого (конечного или бесконечного) числа зон устойчивости и их исчезновение непосредственно в точке топологического перехода.

2) Образование областей сложного поведения проводимости конечного размера в области электронной холловской проводимости при приближении к топологическому переходу и их превращение в зоны устойчивости в точке перехода (или присоединение их к уже существующим зонам).

Аналогично, изменение картины устойчивых открытых траекторий при прохождении седловой особой точки индекса 2 в обратном направлении может производить изменения на диаграммах проводимости перечисленных ниже типов со следующими возможными изменениями типа диаграммы:

$$\begin{aligned} A_- &\rightarrow \{1_-, A_-\} \\ B &\rightarrow B \\ A_+ &\rightarrow \{A_+, B\} \\ 1_+ &\rightarrow A_+ \\ 0_+ &\rightarrow A_+. \end{aligned}$$

При этом картина зон устойчивости на диаграмме проводимости может претерпевать следующие специфические изменения.

1) Появление (конечного или бесконечного числа) новых зон устойчивости нулевого размера в точке перехода и постепенное увеличение их размера при дальнейшем удалении от нее.

2) Исчезновение некоторых зон устойчивости конечного размера (или их частей) с образованием областей сложного поведения проводимости с электронным типом холловской проводимости. При этом, если данный эффект наблюдается на диаграмме типа A_+ , она превращается в диаграмму типа B , с появлением бесконечного числа зон устойчивости, а также направлений $\mathbf{B}$, отвечающих возникновению траекторий Царева или Дынникова на поверхности Ферми.

Здесь можно также отметить, что каждое из приведенных выше описаний может быть использовано также и в случае, когда имеет место прохождение сразу нескольких особых точек одного и того же типа. Такая ситуация, в действительности, может возникать довольно часто для дисперсионных соотношений, обладающих дополнительной (вращательной) симметрией.

Что касается одновременного прохождения особых точек разного типа, такая ситуация является ситуацией необщего положения и наблюдается лишь для специальных дисперсионных соотношений. В частности, она может относиться к соотношениям, разделяющим соотношения с простыми угловыми диаграммами (с единственной зоной устойчивости) и соотношения со сложными угловыми диаграммами.

Каждое из приведенных выше описаний изменения диаграмм проводимости, конечно, может быть использовано и для дисперсионных соотношений с простыми угловыми диаграммами с учетом особенностей эволюции диаграмм проводимости для таких соотношений.

В завершение, нам хотелось бы отметить, что, хотя приведенная выше картина относится в первую очередь к изменениям структуры зон устойчивости на диаграммах проводимости, она также, в действительности, описывает многие особенности появления и исчезновения неустойчивых открытых траекторий системы (1) на поверхности Ферми при описанных перестройках. При этом, если говорить о траекториях типа Царева или Дынникова, их появление неразрывно связано с диаграммами типа B и, таким образом, полностью определяется картиной зон устойчивости на единичной сфере.

Если рассматривать неустойчивые периодические открытые траектории системы (1), то, как можно было видеть, большинство из них также связано с зонами устойчивости и появляются или вблизи их краев, или в областях сложного поведения проводимости. Как также можно было видеть, большинство таких траекторий при этом не изменяются непосредственно в точке топологического перехода, а претерпевают изменения на некотором расстоянии от него, следуя за изменениями соответствующей зоны устойчивости.

Среди неустойчивых периодических траекторий системы (1), однако, следует также особо отметить траектории, не привязанные ни к какой конкретной зоне устойчивости на диаграмме проводимости. В действительности, направления $\mathbf{B}$, отвечающие появлению таких траекторий, почти всегда принадлежат некоторым зонам Ω_α при рассмотрении всего дисперсионного соотношения, а соответствующие траектории согласованы с устойчивыми открытыми траекториями, возникающими в этих зонах. Однако, появляясь вдали от соответствующего интервала $(\tilde{\epsilon}_1(\mathbf{B}), \tilde{\epsilon}_2(\mathbf{B}))$, они обычно не очень интересны с этой точки зрения. Вместо этого, однако, они обычно тесно связаны с топологией заданной

поверхности Ферми и хорошо проявляют ее геометрические свойства. Ярким примером таких траекторий являются периодические траектории, рассматривавшиеся в работе [1]. Нетрудно видеть, что изменения, связанные с появлением или исчезновением таких траекторий, отвечают переходам между диаграммами типа 0 и 1, либо не меняют типа диаграммы проводимости.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассматриваются топологические переходы Лифшица в металлах и связанные с ними изменения в гальваномагнитных явлениях с точки зрения общей задачи Новикова. А именно, рассмотрена картина возможных изменений электронных траекторий в металле при топологических перестройках поверхности Ферми и соответствующих им изменений поведения электропроводности в присутствии сильных магнитных полей. Рассмотрение базируется на классификации незамкнутых электронных траекторий, возникающих на поверхностях Ферми произвольной сложности, и соответствующих им режимов поведения проводимости в сильных магнитных полях. Основу рассмотрения составляет описание возможных изменений картины устойчивых открытых траекторий на поверхности Ферми при топологических переходах. Как показано в работе, переходы Лифшица сопровождаются целым рядом таких изменений, позволяющих определить особенности топологии перехода, исходя из наблюдения проводимости в сильных магнитных полях. Полученные в работе результаты могут служить одним из инструментов исследования топологических переходов Лифшица в металлах со сложными поверхностями Ферми.

Финансирование. Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант N 21-11-00331 «Геометрические методы в гамильтоновой теории интегрируемых и почти интегрируемых систем».

ЛИТЕРАТУРА

- И. М. Лифшиц, ЖЭТФ **38**, 1569 (1960)
- И. М. Лифшиц, М. Я. Азбель, М. И. Каганов, *Электронная теория металлов*, Наука, Москва (1971).
- G. E. Volovik, *Topological Lifshitz Transitions*, Fizika Nizkikh Temperatur **43**, 57 (2017).
- Г. Е. Воловик, *Экзотические переходы Лифшица в топологической материи*, УФН **188**, 95 (2018).
- И. М. Лифшиц, М. Я. Азбель, М. И. Каганов, ЖЭТФ **31**, 63 (1956).
- И. М. Лифшиц, В. Г. Песчанский, ЖЭТФ **35**, 1251 (1958).
- И. М. Лифшиц, В. Г. Песчанский, ЖЭТФ **38**, 188 (1960).
- С. П. Новиков, УМН **37**, 3 (1982).
- А. В. Зорич, УМН **39**, 235 (1984).
- И. А. Дынников, УМН **47**, 161 (1992).
- С. П. Царев, Частное сообщение, (1992-1993).
- И. А. Дынников, Математические заметки **53**, 57 (1993).
- A. V. Zorich, in: *Geometric Study of Foliations*, Tokyo, November 1993, ed. by T. Mizutani et al., World Scientific, Singapore (1994), p. 479.
- I. A. Dynnikov, *Surfaces in 3-torus: Geometry of Plane Sections*, Proc. of ECM2, BuDA (1996).
- I. A. Dynnikov, Amer. Math. Soc. Transl. Ser. 2, Vol. 179, AMS, Providence, RI (1997), p. 45.
- И. А. Дынников, УМН **54**, 21 (1999).
- С. П. Новиков, А. Я. Мальцев, Письма в ЖЭТФ **63**, 809 (1996).
- А. Я. Мальцев, ЖЭТФ **112**, 1710 (1997).
- С. П. Новиков, А. Я. Мальцев, УФН **168**, 249 (1998).
- A. Ya. Maltsev and S. P. Novikov, J. Stat. Phys. **115**, 31 (2004).
- А. Я. Мальцев, С. П. Новиков, Труды МИАН **302**, 296 (2018).
- С. П. Новиков, Р. Де Лео, И. А. Дынников, А. Я. Мальцев, ЖЭТФ **156**, 761 (2019).
- A. V. Zorich, Annales de l'Institut Fourier **46**, 325 (1996).
- A. Zorich, *On Hyperplane Sections of Periodic Surfaces. Solitons, Geometry, and Topology: On the Crossroad*, ed. by V. M. Buchstaber and S. P. Novikov, Translations of the AMS, Ser. 2, AMS, Providence, RI (1997), Vol. 179, p. 173; DOI: <http://dx.doi.org/10.1090/trans2/179>.

25. A. Zorich, *How do the Leaves of Closed 1-Form Wind around a Surface*, in: *Pseudoperiodic Topology*, ed. by V. I. Arnold, M. Kontsevich, and A. Zorich, Translations of the AMS, Ser. 2, AMS, Providence, RI (1999), Vol. 197, p. 135; DOI: <http://dx.doi.org/10.1090/trans2/197>.
26. Р. Де Лео, УМН **55**, 181 (2000).
27. Р. Де Лео, УМН **58**, 197 (2003).
28. A. Ya. Maltsev and S. P. Novikov, *Dynamical Systems, Topology and Conductivity in Normal Metals*, arXiv:cond-mat/0304471; DOI: 10.1023/B:JOSS.0000019835.01125.92
29. A. Ya. Maltsev and S. P. Novikov, Solid State Phys., Bulletin of Braz. Math. Society, New Series **34**, 171 (2003).
30. A. Zorich, *Flat Surfaces*, in: *Frontiers in Number Theory, Physics and Geometry*, ed. by P. Cartier, B. Julia, P. Moussa, P. Vanhove, Springer-Verlag, Berlin (2006), Vol. 1, p. 439.
31. Р. Де Лео, И. А. Дынников, УМН **62**, 151 (2007).
32. R. De Leo, I. A. Dynnikov, Geom. Dedicata **138**:1, 51 (2009).
33. И.А. Дынников, Труды МИАН **263**, 72 (2008)
34. A. Skripchenko, Discrete Contin. Dyn. Sys. **32**, 643 (2012).
35. A. Skripchenko, Ann. Glob. Anal. Geom. **43**, 253 (2013).
36. I. Dynnikov, A. Skripchenko, *On Typical Leaves of a Measured Foliated 2-Complex of Thin Type*, *Topology, Geometry, Integrable Systems, and Mathematical Physics: Novikov's Seminar 2012-2014*, in: *Advances in the Mathematical Sciences*, ed. by V. M. Buchstaber, B. A. Dubrovin, and I. M. Krichever, Amer. Math. Soc. Transl. Ser. 2, Providence, RI (2014), Vol. 234, p. 173; arXiv: 1309.4884.
37. I. Dynnikov and A. Skripchenko, *Symmetric Band Complexes of Thin Type and Chaotic Sections which are not Actually Chaotic*, Trans. Moscow Math. Soc. **32**, 287 (2015).
38. A. Avila, P. Hubert, and A. Skripchenko, Inventiones Mathematicae **206**, 109 (2016).
39. A. Avila, P. Hubert, and A. Skripchenko, Bulletin de la Societe Mathematique de France **144**, 539 (2016).
40. R. De Leo, *A Survey on Quasiperiodic Topology*, in: *Advanced Mathematical Methods in Biosciences and Applications*, ed. by F. Berezovskaya and B. Toni STEAM-H: Science, Technology, Engineering, Agriculture, Mathematics and Health Springer, Cham (2019), p. 53.
41. А. Я. Мальцев, С.П. Новиков, УМН **74**, 149 (2019).
42. И. А. Дынников, А. Я. Мальцев, С. П. Новиков, УМН **77**, 109 (2022).
43. А. Я. Мальцев, ЖЭТФ **151**, 944 (2017).
44. А. Я. Мальцев, ЖЭТФ **152**, 1053 (2017).
45. А. Я. Мальцев, ЖЭТФ **156**, 140 (2019).

ГИДРАВЛИЧЕСКИЙ ПРЫЖОК ДЛЯ ПРЯМОЛИНЕЙНОГО И ОСЕСИММЕТРИЧНОГО ТЕЧЕНИЯ СЛОЯ ЖИДКОСТИ

А. Д. Сухов^{а, b*}, А. Г. Петров^{а**}

^а Институт проблем механики им. А. Ю. Ишлунского Российской академии наук
119526, Москва, Россия

^б Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
141701, Долгопрудный, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 13 апреля 2023 г.,
после переработки 23 мая 2023 г.
Принята к публикации 24 мая 2023 г.

Рассматривается течение жидкости со свободной границей, которая задается как функция высоты от координаты x с двумя асимптотами на положительной и отрицательной бесконечностях (гидравлический прыжок). Для описания явления используется приближение Буссинеска, а также вводится дополнительная сила. Сила подбирается зависящей только от высоты поверхности. Задача решается аналитически без применения численных схем. При помощи данной методики определяются поверхность прыжка и действующая сила в зависимости от координаты распространения волны.

DOI: 10.31857/S0044451023110147

EDN: PKGVNL

1. ВВЕДЕНИЕ

Течение в открытых каналах как направление гражданского строительства изучается уже долгое время с помощью лабораторных, численных и натурных экспериментов. Гидравлический прыжок возникает, когда число Фруда $Fr = u/\sqrt{gh}$ становится много большим единицы [1, 2]. Тогда уровень воды резко возрастает, что в строительстве может использоваться в качестве механизма рассеивания энергии. При этом ключевыми параметрами для проектирования водных сооружений являются место, где происходит прыжок, его начальная глубина и протяженность прыжка. Пионером в данной области был французский ученый Беланджер, который экспериментально связал отношение двух высот прыжка и начальное число Фруда [3]. Рэлей [4] установил эту связь из законов сохранения расхода и импульса. В более поздних работах по гидравлическому прыжку [5–9] еще много раз были найде-

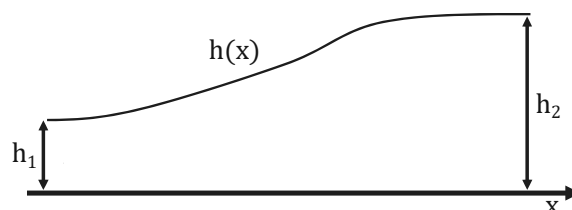


Рис. 1. Постановка задачи гидравлического прыжка

ны основные параметры потока, такие как отношение высот прыжка, длина и профиль прыжка, которые позволяют провести наиболее полное сравнение результатов теоретического и экспериментального исследований. Данная работа посвящена исследованию профиля плоского гидравлического прыжка, т.е. стационарного течения жидкости со свободной поверхностью в виде функции $h(x)$ и двумя горизонтальными асимптотами:

$$h(-\infty) = h_1, \quad h(+\infty) = h_2,$$

где $h_1 < h_2$. На рис. 1 представлена схема, демонстрирующая постановку задачи.

2. ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

Сначала запишем классические для теории гидравлического прыжка законы сохранения расхода и

* E-mail: sukhov.ad@phystech.edu

** E-mail: petrovipmech@gmail.com

импульса [3, 4, 10], где индексом «1» помечаются характеристики жидкости перед прыжком и индексом «2» — за прыжком:

$$u_1 h_1 = u_2 h_2 = Q, \quad u_2^2 h_2 - u_1^2 h_1 = -\frac{g}{2} (h_2^2 - h_1^2). \quad (1)$$

Отсюда можно получить формулу для расхода через асимптотические высоты. Разрешая систему

$$u_1 h_1 = u_2 h_2, \quad u_2 Q - u_1 Q = -\frac{g}{2} (h_2^2 - h_1^2)$$

относительно u_1 и u_2 , получим соотношения, найденные Рэлеем [4, 10]:

$$u_1 = \frac{g}{2Q} h_2 (h_1 + h_2), \quad u_2 = \frac{g}{2Q} h_1 (h_1 + h_2), \quad (2)$$

$$Q^2 = \frac{g h_1 h_2 (h_1 + h_2)}{2}. \quad (3)$$

Это соотношение хорошо согласуется с экспериментальными данными и полезно для измерения расхода [1, 11, 12]. Рэлей показал [4, 10], что в гидравлическом прыжке потеря энергии

$$\frac{1}{2} \rho (u_1^2 - u_2^2) + \rho g (h_1 - h_2)$$

вследствие законов сохранения (1) равна

$$\frac{\rho g (h_2 - h_1)^3}{4 h_1 h_2} > 0.$$

Отсюда он заключил, что возможен только скачок повышения $h_2 > h_1$ при числе Фруда

$$\text{Fr}^2 = \frac{u_1^2}{g h_1} = \frac{Q^2}{g h_1^3} = \frac{h_2}{2 h_1} \left(1 + \frac{h_2}{h_1} \right) > 1 \quad (4)$$

при скорости выше критической $u_1 > \sqrt{g h_1}$. Разрешая квадратное уравнение (4) относительно h_2/h_1 , найдем зависимость отношения h_2/h_1 от числа Фруда:

$$\frac{h_2}{h_1} = \frac{\sqrt{1 + 8 \text{Fr}^2} - 1}{2}, \quad (5)$$

которая широко используется для инженерных расчетов [1, 11, 12].

Ниже с использованием приближения Буссинеска получено аналитическое описание гидравлического прыжка, согласованное с зависимостью для отношения высот (4).

3. ПРИБЛИЖЕНИЕ БУССИНЕСКА

Система уравнений Буссинеска для каналов [13–16]

$$Q = hu, \quad hu \frac{du}{dx} = -\frac{dP}{dx}, \quad P = \frac{gh^2}{2} + \frac{\ddot{h}h^2}{3}, \quad (6)$$

$$\ddot{h} = u \frac{d}{dx} \left(u \frac{dh}{dx} \right)$$

интегрируется следующим образом. Сначала интегрируется второе уравнение (6): $Qu + P + A_1 = 0$. Подставляя в него выражение для P и $u = Q/h$, получим

$$\frac{Q^2}{h} + \frac{gh^2}{2} + \frac{hQ^2}{3} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{h} \frac{dh}{dx} \right) + A_1 = 0.$$

Если умножить это уравнение на $\frac{1}{h^2} \frac{dh}{dx}$, то его можно записать в виде производной:

$$\frac{d}{dx} \left[-\frac{Q^2}{2h^2} + \frac{gh}{2} + \frac{Q^2}{6} \left(\frac{1}{h} \frac{dh}{dx} \right)^2 - \frac{A_1}{h} \right] = 0.$$

Отсюда получаем полный интеграл системы. Из него можно выразить производную высоты поверхности по координате как функцию от высоты поверхности:

$$(h')^2 = \text{Pol}(h),$$

$$\text{Pol}(h) = 3 \left(1 + \frac{2}{Q^2} A_1 h + \frac{2}{Q^2} A_2 h^2 - \frac{gh^3}{Q^2} \right). \quad (7)$$

Это уравнение приведено в [13] и последующих работах [14, 15]. Кубический полином $\text{Pol}(h)$ имеет три корня. Если корни действительные $h_0 < h_1 < h_2$, то уравнение имеет вид

$$h' = \pm \sqrt{\text{Pol}(h)},$$

$$\text{Pol}(h) = 3 \left(1 - \frac{h}{h_0} \right) \left(1 - \frac{h}{h_1} \right) \left(1 - \frac{h}{h_2} \right), \quad (8)$$

и определяет периодические волны. Корни h_1 и h_2 соответствуют низшей и высшей точкам волны $h_1 = \min(h)$, $h_2 = \max(h)$. В случае совпадения корней $h_0 = h_1$ получаются решения в виде уединенной волны (солитона).

Расход Q выражается через h_0, h_1, h_2 из уравнений (7) и (8) путем приравнивания коэффициентов в полиноме при третьей степени h^3 следующим образом: $Q^2 = g h_0 h_1 h_2 < g h_1 h_2 (h_1 + h_2)/2$. Он меньше, чем расход (2) в гидравлическом прыжке, который вытекает из законов сохранения. Поэтому система уравнений (6) неприменима для описания гидравлического прыжка. Его можно попытаться описать, дополнив уравнения (6) силой f :

$$Q = hu, \quad hu \frac{du}{dx} = -\frac{dP}{dx} - f, \quad P = \frac{gh^2}{2} + \frac{\ddot{h}h^2}{3}. \quad (9)$$

Данная сила имеет физический смысл сопротивления на дне и вихревых сопротивлений на свободной границе гидравлического прыжка.

Такой же подход применен в работе [17], в которой сила берется пропорциональной квадрату скорости. Однако проинтегрировать аналитически систему уравнений в [17] не удастся, и она исследуется только численно. Ниже сила выражается через ее потенциал G так, чтобы выполнялись законы сохранения (1). Покажем, что сила, определяемая по формуле

$$f = -\frac{dG}{dx}, \quad G = \frac{Q^2}{h_1 h_2} \left(h^2 \left(\frac{1}{h_1} + \frac{1}{h_2} \right) - \frac{h^3}{h_1 h_2} \right) - \frac{gh^2}{2}, \quad (10)$$

с расходом Q , равным (3), не меняет импульс системы. Действительно, импульс в системе изменяется на величину

$$\int_{-\infty}^{\infty} f dx = -G(h_2) + G(h_1).$$

Находим значения

$$G(h_2) = \frac{Q^2}{h_1} - \frac{gh_2^2}{2}, \quad G(h_1) = \frac{Q^2}{h_2} - \frac{gh_1^2}{2}.$$

Их разность

$$G(h_2) - G(h_1) = \frac{(h_1 - h_2) (gh_1 h_2 (h_1 + h_2) - 2Q^2)}{2h_1 h_2}$$

при расходе (3) действительно равна нулю, что и требовалось доказать.

Уравнения (9) с учетом (10) можно записать в виде

$$Q = hu, \quad hu \frac{du}{dx} = -\frac{dP_1}{dx},$$

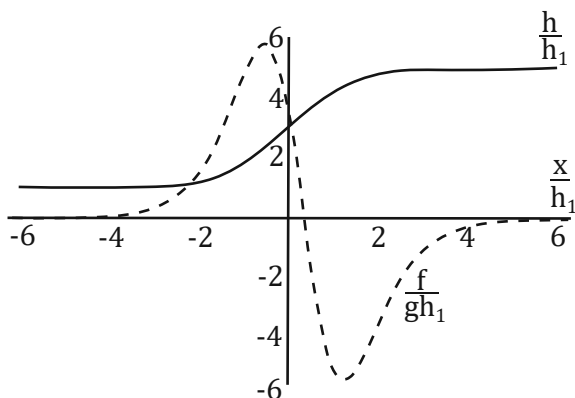


Рис. 2. Зависимости силы (штриховая линия) и формы прыжка (сплошная линия) от координаты

$$P_1 = \frac{Q^2}{h_1 h_2} \left(h^2 \left(\frac{1}{h_1} + \frac{1}{h_2} \right) - \frac{h^3}{h_1 h_2} \right) + \frac{\ddot{h} h^2}{3}.$$

Они интегрируются так же, как и уравнение (6). Сначала интегрируем второе уравнение:

$$\frac{Q^2}{h} + \frac{Q^2}{h_1 h_2} \left(h^2 \left(\frac{1}{h_1} + \frac{1}{h_2} \right) - \frac{h^3}{h_1 h_2} \right) + \frac{hQ^2}{3} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{h} \frac{dh}{dx} \right) + A_1 = 0. \quad (11)$$

Умножая его на $\frac{1}{h^2} \frac{dh}{dx}$, находим

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \left[-\frac{Q^2}{2h^2} + \frac{Q^2}{h_1 h_2} \left(h \left(\frac{1}{h_1} + \frac{1}{h_2} \right) - \frac{h^2}{2h_1 h_2} \right) + \right. \\ \left. + \frac{Q^2}{6} \left(\frac{1}{h} \frac{dh}{dx} \right)^2 - \frac{A_1}{h} \right] = 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow -\frac{Q^2}{2h^2} + \frac{Q^2}{h_1 h_2} \left(h \left(\frac{1}{h_1} + \frac{1}{h_2} \right) - \frac{h^2}{2h_1 h_2} \right) + \\ + \frac{Q^2}{6} \left(\frac{1}{h} \frac{dh}{dx} \right)^2 - \frac{A_1}{h} - A_2 = 0. \quad (12) \end{aligned}$$

Подставляя в (11) и (12) предельные значения $h(-\infty) = h_1$, $dh/dx(-\infty) = 0$ и расход (3), найдем следующие значения для постоянных интегрирования:

$$\begin{aligned} A_1 &= -\frac{1}{2}g(h_1 + h_2)^2, \\ A_2 &= \frac{g(h_1 + h_2) (h_1^2 + 4h_2 h_1 + h_2^2)}{4h_1 h_2}, \\ Q^2 &= \frac{gh_1 h_2}{2} (h_1 + h_2). \end{aligned}$$

Разрешая уравнение (12) относительно $(dh/dx)^2$ с учетом найденных постоянных интегрирования, получим автономное дифференциальное уравнение

$$\left(\frac{dh}{dx} \right)^2 = 3 \left(1 - \frac{h}{h_2} \right)^2 \left(1 - \frac{h}{h_1} \right)^2. \quad (13)$$

Как известно, общее решение автономного уравнения получается из частного $h(x)$ сдвигом аргумента $h(x+c)$ на произвольную константу c . Поэтому достаточно найти частное решение уравнения (13):

$$\begin{aligned} Y &= \frac{h(x)}{h_1} = \frac{1 + h_{21} E(x/h_1)}{1 + E(x/h_1)}, \\ E(X) &= \text{Exp} \left[\frac{h_{21} - 1}{h_{21}} \sqrt{3} X \right], \end{aligned}$$

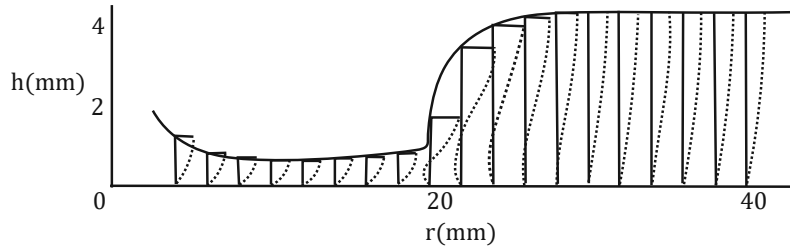


Рис. 3. Эпюры скоростей, адаптировано из работы [18]

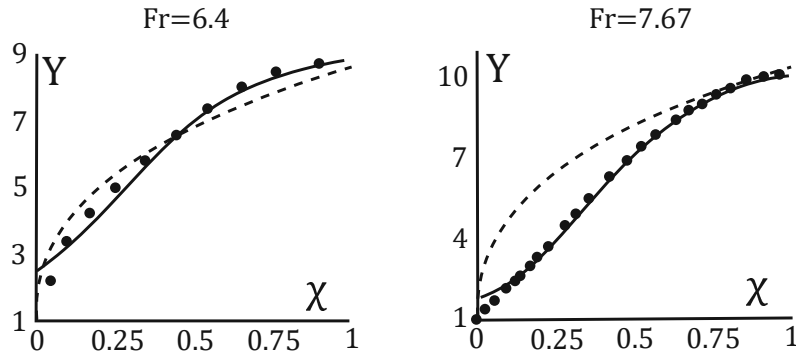


Рис. 4. Сравнение профиля прыжка с данными эксперимента и другой современной аналитической модели с разными начальными числами Фруда (6.4 слева и 7.67 справа). Черные точки — эксперимент [8], черная линия — представленная аналитическая модель, черная штриховая линия — аналитическая модель из [19]

$$h_{21} = \frac{h_2}{h_1}. \quad (14)$$

Оно удовлетворяет условию

$$h(0) = \frac{h_1 + h_2}{2}.$$

Все решения общего класса $h(x+c)$ удовлетворяют условиям гидравлического прыжка на бесконечностях. Таким образом, формула (14) определяет профиль гидравлического прыжка при заданном соотношении высот на бесконечностях h_{21} . А само соотношение высот хорошо предсказывается исходя из соотношения Беланджера [3, 10–12].

На рис. 2 изображены зависимости (14) безразмерного уровня h/h_1 и (10) безразмерной силы $f/(gh_1)$ от безразмерной координаты x/h_1 при $h_{21} = 5$.

4. ПРЫЖОК ПРИ ОСЕСИММЕТРИЧНОМ РАСТЕКАНИИ ЖИДКОГО СЛОЯ

В опытах по осесимметричному растеканию жидкости также наблюдаются гидравлические прыжки. В них длина прыжка существенно меньше, чем расстояние до оси симметрии. Поэтому формы прыжков для прямолинейного и осесимметричного

течений жидкости близки. Ниже учитывается различие геометрий этих прыжков из-за кривизны фронта прыжка при осесимметричном растекании жидкости. Уравнения (9) для осесимметричного растекания жидкого слоя имеют вид

$$\begin{aligned} QR &= rhu, \\ hu \frac{du}{dr} &= -\frac{dP}{dr} - f, \\ P &= \frac{gh^2}{2} + \frac{\ddot{h}h^2}{3}, \end{aligned}$$

где r — цилиндрическая координата, а R — постоянная размерности длины.

Пусть точка $r = R$ является серединой прыжка. Тогда с помощью замены $r = R + x$ уравнения в окрестности точки $r = R$ можно записать в виде

$$\begin{aligned} Q &= \left(1 + \frac{x}{R}\right) hu, \\ Q \left(1 - \frac{x}{R}\right) \frac{du}{dx} &= -\frac{dP}{dx} - f, \\ P &= \frac{gh^2}{2} + \frac{\ddot{h}h^2}{3}. \end{aligned}$$

Проинтегрируем уравнение импульса по x от начала прыжка $x = -x_0$ со значениями

$$h(-x_0) = h_1, \quad u(-x_0) = u_1$$

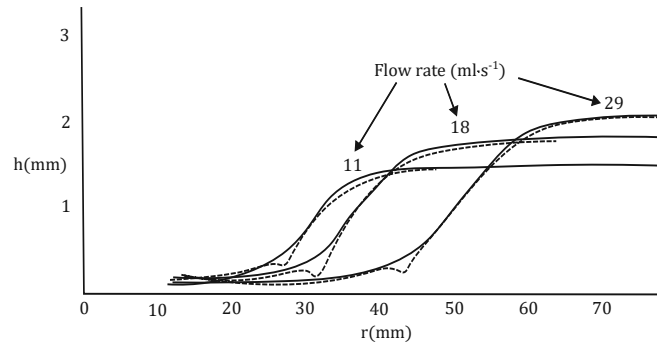


Рис. 5. Сравнение результатов нашей теории (сплошные линии) с экспериментальными данными из [20] (пунктирные линии)

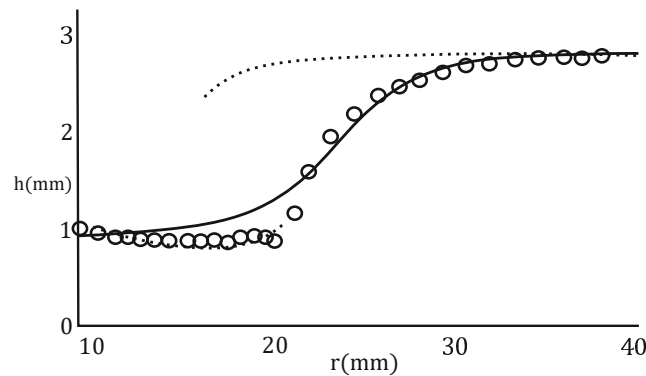


Рис. 6. Сравнение результатов нашей теории (сплошная линия) с теоретическими данными из [21] (пунктирные линии) и экспериментальными данными из [22] (кружки)

до точки установления $x = x_0$, в которой

$$h(x_0) = h_2, \quad u(x_0) = u_2.$$

Учитывая, что

$$h\ddot{h}\Big|_{-x_0}^{x_0} = \int_{-x_0}^{x_0} f dx = 0,$$

и предполагая, что R значительно превышает длину прыжка, с точностью до малых x/R первого порядка получим

$$Q(u_2 - u_1) + \frac{g}{2} (h_2^2 - h_1^2) = \frac{Q}{R} \int_{-x_0}^{x_0} x \frac{du}{dx} dx.$$

Это уравнение отличается от закона сохранения (1) на малую величину, пропорциональную $1/R$. Интеграл можно вычислить, подставив в него функцию

$$u = \frac{Q}{h(x)} = \frac{Q}{h_1} \frac{1 + E(X)}{1 + h_{21}E(X)}, \quad X = \frac{x}{h_1},$$

нулевого приближения (14) и заменив конечные пределы интегрирования на бесконечные:

$$\int_{-x_0}^{x_0} x \frac{du}{dx} dx = Q \int_{-\infty}^{\infty} X \frac{d}{dX} \left(\frac{1 + E(X)}{1 + h_{21}E(X)} \right) dX = Q \frac{\ln h_{21}}{\sqrt{3}}.$$

Отсюда законы сохранения принимают вид

$$\left(1 - \frac{x_0}{R}\right) h_1 u_1 = \left(1 + \frac{x_0}{R}\right) h_2 u_2 = Q, \\ -\frac{g}{2} (h_2^2 - h_1^2) = Q(u_2 - u_1) - \frac{Q^2}{R} \frac{\ln h_{21}}{\sqrt{3}}.$$

Эта система отличается от (1) малыми членами, пропорциональными $1/R$. Разрешая эту систему относительно u_1, u_2 , получим решение (2), дополненное малыми поправками, пропорциональными $1/R$:

$$u_1 = \frac{g}{2Q} h_2 (h_1 + h_2) \left(1 - \frac{h_1(6x_0 + h_2 \ln h_{21} \sqrt{3})}{3R(h_2 - h_1)}\right),$$

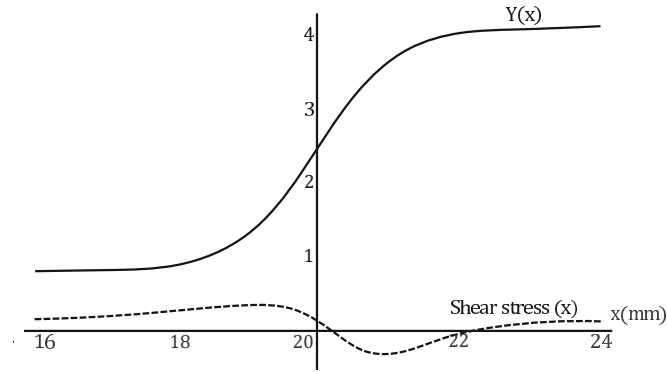


Рис. 7. Профиль и касательное напряжение вдоль оси прыжка

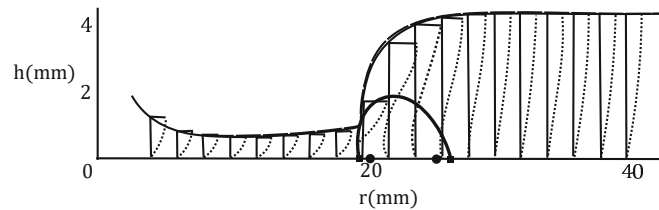


Рис. 8. Сравнение точек отрыва, найденных из формулы (16) и полученных численно [18]. Черные круги — данные по представленной модели, черные квадраты — численный расчет

$$u_2 = \frac{g}{2Q} h_1 (h_1 + h_2) \left(1 - \frac{h_1 (6x_0 + h_2 \ln h_{21} \sqrt{3})}{3R (h_2 - h_1)} \right).$$

Отсюда следует уточненная по сравнению с (3) формула для расхода

$$Q^2 = \frac{g}{2} h_1 h_2 (h_1 + h_2) \times \left(1 - \frac{3(h_1 + h_2)x_0 + \sqrt{3}h_1 h_2 \ln h_{21}}{3R (h_2 - h_1)} \right)$$

и уточненная по сравнению с (4) формула для числа Фруда

$$\begin{aligned} \text{Fr}^2 &= \frac{u_1^2}{gh_1} = \frac{Q^2}{gh_1^3} \left(1 + 2\frac{x_0}{R} \right) = \\ &= \frac{h_{21}}{2} (1 + h_{21}) \times \\ &\times \left(1 - \frac{3 - h_{21} \frac{x_0}{R}}{h_{21} - 1} - \frac{\ln h_{21}}{\sqrt{3} (h_{21} - 1)} \frac{h_2}{R} \right). \end{aligned} \quad (15)$$

Обозначим через z зависимость невозмущенной относительной величины скачка (5):

$$z = \frac{\sqrt{1 + 8\text{Fr}^2} - 1}{2}.$$

Через нее можно выразить возмущенное относительное значение скачка и число Фруда:

$$h_{21} = z + \frac{z(1+z)}{(z-1)(2z+1)} \left(- (z-3) \frac{x_0}{R} + \frac{\ln z}{\sqrt{3}} \frac{h_2}{R} \right),$$

$$z = \frac{\sqrt{1 + 8\text{Fr}^2} - 1}{2},$$

где $2x_0$ — длина скачка. Можно предложить приближенную оценку поправочного члена на интервале чисел Фруда $\text{Fr} \in (2, 4.5)$,

$$h_{21} = \frac{\sqrt{1 + 8\text{Fr}^2} - 1}{2} + \frac{1}{2R} \left(\frac{\text{Fr} (6 - \text{Fr}^2)}{\text{Fr}^2 - 1} x_0 + h_2 \right),$$

на этом интервале чисел Фруда величина скачка меняется в диапазоне $h_{21} \in (1.45, 4)$. Эта формула удобна для проведения инженерных расчетов.

5. АНАЛИЗ СИЛЫ СОПРОТИВЛЕНИЯ И ФОРМЫ ПРЫЖКА

Как видно из графика на рис. 2, сила сопротивления f примерно до середины прыжка положительна, а после середины отрицательна. Это согласуется с численными расчетами Ватанабе [18]. На рис. 3 приведены эпюры скоростей из [18]. Из них следует, что действительно сдвиг скорости на дне соответствует положительной силе трения примерно до середины прыжка, а после середины из-за возникшего вихря меняет свой знак, что соответствует отрицательной силе трения.

На рис. 4 сплошной линией изображена найденная по предложенной теории зависимость $Y(\chi)$, где

$$\chi = \frac{x + x_0}{2x_0}$$

— относительная координата от выделенного подножия прыжка до точки набора максимальной высоты поверхности прыжка. Видно, что она описывает экспериментальную форму прыжка [8] (точки) при больших числах Фруда лучше, чем другая современная аналитическая модель [19] (штриховая линия). Рисунок 3 показывает, насколько сложен характер течения жидкости при изменении глубины прыжка. Сдвиговой характер течения возле дна и появление вихревой зоны показывает, что сдвиг скорости на дне меняет свое направление, что соответствует изменению знака силы, действующей на слой жидкости. На рис. 5 приведено сравнение теоретической кривой (сплошная линия) с экспериментальными данными [20] (точки) при различных скоростях потока для осесимметричного прыжка. Сравнение теоретической кривой (сплошная линия) с результатами расчета из [6] и эксперимента из [22] приведено на рис. 6. Представленная модель описывает изменение высоты профиля скачка вдоль координаты.

6. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДЛИНЫ ПРЫЖКА

Длину прыжка будем определять исходя из того, что поток отрывается от дна, а затем присоединяется. Расстояние между этими двумя точками отрыва определяет характерную длину прыжка. Точки отрыва определяем как точки, где касательное напряжение равно нулю. Касательное напряжение связываем со скоростью на границе при помощи метода Лойцянского [23–27]:

$$\frac{v'(x)}{v^b(x)} \int_0^{x_{cr}} (v(x))^{b-1} dx + 0.202 = 0, \quad b = 5.35. \quad (16)$$

Исходя из этого, находим точки x_{cr} . Скорость находится через расход и высоту

$$v(x) = \frac{Q}{h(x)}$$

для плоского случая и

$$v(x) = \frac{Q}{2\pi RY(x)}$$

для осесимметричного случая. На рис. 7 представлены профиль и касательное напряжение вдоль оси

прыжка. А на рис. 8 проведено сравнение отрывной зоны, полученной с помощью (16), с результатами численного расчета для осесимметричного случая из [18], которое подтверждает применимость данного метода для определения длины прыжка.

7. ВЫВОДЫ

Получена аналитическая зависимость, описывающая форму прыжка в зависимости от соотношения высот на бесконечности. Само отношение высот может быть определено из числа Фруда у подножия с помощью формулы Беланжера. Для описания прыжка предложена модель с приближением Буссинеска и с учетом силы трения, действующей на прыжок со стороны подложки. Природа этой силы качественно подтверждена численными расчетами, она положительна до первой половины прыжка, но после середины прыжка становится отрицательной из-за появления вихревой зоны, что видно на рис. 3. Решение полученных уравнений записывается в виде простых элементарных функций и хорошо описывает форму прыжка. Таким образом, сложная структура гидравлического прыжка была описана простыми формулами в элементарных функциях. Также проведено сравнение с существующими аналитическими моделями и экспериментальными данными, результаты представлены на рис. 4–6.

Точки отрыва находятся с помощью теории пограничного слоя из условия равенства нулю касательного напряжения. На рис. 8 приведено сравнение с численным расчетом.

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 22-21-00833).

ЛИТЕРАТУРА

1. И.И. Агроскин, *Гидравлика*, Энергия, Москва (1964).
2. W. H. Hager, *Critical Fow Condition in Open Channel Hydraulics*, Acta Mechanica **54**, 157 (1985).
3. J.B. Belanger, *Essay on the Numerical Solution of Some Problems Relative to Steady Flow of Water*, Chez Carilian-Goeury libraire, Paris (1828).
4. Lord Rayleigh, *On the Theory of Long Waves and Bore*, Proc. Roy. Soc. A **90**, 324 (1914).
5. W. H. Hager and K. Hutter, *Approximate Treatment of the Plane Hydraulic Jump with Separation*, *Approximate Treatment of the Plane Hydraulic Jump*

- with Separation Zone Above the Flow Zone*, J. Hydraulic Res. **21**, 195 (1983).
6. R. Schröder, *A Contribution to the Question of Energy Dissipation and the Turbulence of Discontinuous Water Flow*, Institute of Hydraulic Engineering and Water Resources Management, Berlin (1957).
 7. R. Schröder, *The Turbulent Flow in the Free Alternating Jump*, Institute of Hydraulic Engineering and Water Resources Management, Berlin (1963).
 8. F. Murzyn and H. Chanson, *Free Surface, Bubbly Flow and Turbulence Measurements in Hydraulic Jumps*, The University of Queensland, Brisbane (2007).
 9. K. Woycicki, *Water Jump, Cover Roller and Discharge under a Contactor*, ETH Zurich, Zurich (1931).
 10. H. Lamb, *Hydrodynamics*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1932).
 11. R.M. Khatsuria, *Hydraulics of Spillways and Energy Dissipators*, CRC Press, Atlanta (2004).
 12. J.J. Bloomer, *Practical Fluid Mechanics for Engineering Applications*, Marcel Dekker, New York (2000).
 13. T. B. Benjamin and M. J. Lighthill, *On Cnoidal Waves and Bores*, Proc. Roy. Soc. London, Ser. A, Math. Phys. Sci. **224**, 448 (1954).
 14. A.G. Petrov, *Integrating the Long Wave Equations in Kulikovskii–Drozdova Form*, Dokl. Ross. Akad. Nauk **373**, 762 (2000).
 15. A.G. Petrov, *Integration of the Boussinesq Equations for Steady Channel and Jet Flows*, Fluid Dynamics **42**, 966 (2007).
 16. Yu.A. Drozdova and A.G. Kulikovskii, *Concerning the Description of Long Nonlinear Waves in Channels*, Fluid Dynamics **31**, 739 (1996).
 17. G. L. Richard and S. L. Gavriluk, *The Classical Hydraulic Jump in a Model of Shear Shallow-water Flows*, J. Fluid Mech. **725**, 492 (2013).
 18. S. Watanabe, *Integral Methods for Shallow Free-surface Flows with Separation*, J. Fluid Mech. **480**, 233 (2003).
 19. O. Castro-Orgaz and W. H. Hager, *Classical Hydraulic Jump: Basic Flow Features*, J. Hydraulic Res. **47**, 744 (2009).
 20. A. D. Craik, R. C. Latham, M.J. Fawkes, and P. W. F. Gribbon, *The Circular Hydraulic Jump*, J. Fluid Mech. **112**, 347 (1981).
 21. R. K. Bhagat and P. F. Linden, *The Circular Hydraulic Jump; the Influence of Downstream Flow on the Jump Radius*, Phys. Fluids **34**, 72 (2022).
 22. T. Bohr, C. Ellegaard, A. E. Hansen, and A. Haaning, *Hydraulic Jumps, Flow Separation and Wave Breaking: An Experimental Study*, Physica B **228**, 1 (1996).
 23. Л.Г. Лойцянский, *Механика жидкости и газа*, Наука, Москва (1973) [L. G. Loitsyanskii, *Mechanics of Liquids and Gases*, Nauka, Moscow (1973), Begell House, New York (1996)].
 24. А.Г. Петров, *Аналитическая гидродинамика*, Физматлит, Москва (2009).
 25. A. G. Petrov, *Saturation Free Numerical Scheme for Computing the Flow Past a Lattice of Airfoils and the Determination of Separation Points in a Viscous Fluid*, Comp. Math. Math. Phys. **51**, 1239 (2011).
 26. A. M. Elizarov, A. R. Kasimov, and D. V. Maklakov, *Shape Optimization in Aerodynamics*, Fizmatlit, Moscow (2009).
 27. A. G. Petrov, A. D. Sukhov, and I. N. Sibgatullin, *Laminar Flow of Viscous Fluid around Elliptical Contours at an Angle of Attack*, Lobachevskii J. Math. **43**, 1184 (2022).

АСИМПТОТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ СОЛИТОНОВ, ПОРОЖДАЕМЫХ ИЗ ИНТЕНСИВНОГО ВОЛНОВОГО ИМПУЛЬСА

*А. М. Камчатнов**

*Институт спектроскопии Российской академии наук,
108840, Москва, Троицк, Россия*

Поступила в редакцию 26 мая 2023 г.,

после переработки 1 июня 2023 г.

Принята к публикации 1 июня 2023 г.

Развита теория преобразования интенсивного начального волнового импульса в солитоны при асимптотически больших временах эволюции. Наш подход основан на том, что такое преобразование происходит через промежуточную стадию формирования и эволюции дисперсионных ударных волн, так что число нелинейных осцилляций в них оказывается равным числу солитонов в асимптотическом состоянии. С помощью теории интегрального инварианта Пуанкаре–Картана мы показываем, что это число осцилляций, равное классическому действию частицы, ассоциированной с волновым пакетом в окрестности малоамплитудного края дисперсионной ударной волны, остается постоянным при переносе течением, описываемым бездисперсионным пределом рассматриваемых нелинейных волновых уравнений. Это позволяет сформулировать обобщенное правило квантования Бора–Зоммерфельда, которое определяет набор «собственных значений», связанных с физическими параметрами солитонов в асимптотическом состоянии, в частности, с их скоростями. Теория не использует свойств полной интегрируемости нелинейных волновых уравнений, но воспроизводит соответствующие результаты и в этом случае. Аналитические результаты подтверждаются численными решениями нелинейных волновых уравнений.

DOI: 10.31857/S0044451023110159

EDN: PLMODU

1. ВВЕДЕНИЕ

Если в нелинейной волновой системе возможно распространение солитонов, то во многих типичных ситуациях достаточно интенсивный начальный импульс эволюционирует в конечном счете в некоторое число N солитонов и относительно небольшое количество энергии трансформируется в линейные волны. Ввиду универсальности этого физического явления является важным уметь вычислять параметры образующихся солитонов по форме начального импульса. Эта задача легко решается в случае полностью интегрируемых нелинейных волновых уравнений (см., например, книги [1–3] и имеющиеся там ссылки). Каждое такое уравнение связано с некоторой линейной спектральной задачей,

в которой распределения волновых переменных играют роль «потенциалов». Хотя эти «потенциалы» изменяются со временем согласно рассматриваемым волновым уравнениям, спектр соответствующей линейной задачи остается постоянным и каждое дискретное собственное значение отвечает солитону в асимптотическом состоянии при $t \rightarrow \infty$. Следовательно, если мы найдем спектр линейной задачи для начальных распределений, то дискретные собственные значения дадут нам всю необходимую информацию о параметрах солитонов при асимптотически больших значениях t .

Эта теория существенно упрощается, если число солитонов в конечном состоянии велико, $N \gg 1$, а начальные распределения выражаются достаточно гладкими функциями, так что к линейной спектральной задаче может быть применен квазиклассический метод ВКБ. Например, уравнение Кортевега–де Фриза (КдФ) ассоциировано со стационарным уравнением Шредингера [4], так что хорошо известное правило квантования Бора–Зоммерфельда легко дает приближенные значения

* E-mail: kamch@isan.troitsk.ru

собственных значений, через которые выражаются скорости солитонов и их амплитуды [5, 6]. Аналогичное правило квантования Бора–Зоммерфельда было получено в работах [7, 8] для спектральной задачи Захарова–Шабата, ассоциированной с нелинейным уравнением Шредингера (НУШ) [9]. Однако если рассматриваемое нелинейное волновое уравнение не является полностью интегрируемым, то такой прямой подход становится невозможным.

Чтобы найти более общий метод расчета параметров асимптотических солитонов, рассмотрим более детально процесс преобразования изначально гладкого импульса в последовательность солитонов. В этом процессе можно выделить три характерных стадии. На первой стадии импульс деформируется, оставаясь гладким, но его профиль на некоторых участках становится благодаря нелинейности более крутым. На этой стадии дисперсионными эффектами можно пренебречь, так что эволюция импульса с хорошей точностью подчиняется уравнениям бездисперсионного (гидродинамического) приближения. На второй стадии профиль становится настолько крутым, что импульс «опрокидывается» с образованием области нелинейных осцилляций благодаря росту дисперсионных эффектов в случае больших градиентов профиля. Такие расширяющиеся со временем области нелинейных осцилляций называются дисперсионными ударными волнами (ДУВ). Согласно подходу Гуревича и Пятаевского [10], они могут быть представлены в виде модулированных периодических решений нелинейных волновых уравнений, причем эволюция модуляционных параметров подчиняется уравнениям Уизема [11, 12]. В этом приближении ДУВ занимает конечную, расширяющуюся со временем, область пространства. На одном крае ДУВ постепенно формируются солитоны, а противоположный малоамплитудный край распространяется с некоторой групповой скоростью по гладкой части эволюционирующего импульса. Таким образом, на второй стадии трансформации гладкого импульса в солитоны волновая структура состоит из областей гладких распределений и расширяющихся ДУВ, которые постепенно распространяются на всю структуру. Число осцилляций в ДУВ увеличивается со временем вследствие разницы между фазовой и групповой скоростью на малоамплитудном крае [13]. На последней третьей стадии эволюции импульса изначально гладкого импульса конечной длины гладкие части в волновой структуре оказываются поглощенными ударными волнами и число осцилляций в них стабилизируется. Расстояние между солито-

нами постепенно растет, так что они превращаются при $t \rightarrow \infty$ в отдельные импульсы с фиксированными параметрами. Для определения числа солитонов и их параметров следует рассмотреть подробнее процесс распространения малоамплитудного края ДУВ.

Пусть нелинейная волновая динамика описывается двумя переменными, которые мы для определенности будем называть «плотностью» ρ и «скоростью течения» u . Периодическое решение $\rho = \rho(x, t)$, $u = u(x, t)$ описывается периодическими функциями фазы θ , которая в непромодулированном случае имеет вид $\theta = kx - \omega t = k(x - Vt)$, где V — фазовая скорость волны. В промодулированной волне волновое число k и частота ω становятся медленными функциями x и t . Поскольку при медленной модуляции волна локально еще может рассматриваться в главном приближении как однородная, то локально волновое число и частота определяются формулами

$$k = \theta_x, \quad \omega = -\theta_t \quad (1)$$

для некоторой фазы $\theta(x, t)$, и тогда одно из модуляционных уравнений можно написать в виде закона сохранения числа волн [11, 12]

$$k_t + \omega_x = 0, \quad (2)$$

где k играет роль плотности волн, а ω — их потока.

На малоамплитудном крае ДУВ мы имеем два различных масштаба длины: короткую длину волны $\sim 2\pi/k$ и большой размер $\sim l$ гладкого импульса с распределениями волновых переменных $\rho_b(x, t)$, $u_b(x, t)$, по которым распространяется этот край. Поэтому мы можем написать

$$\rho(x, t) = \rho_b(x, t) + \rho'(x, t),$$

$$u(x, t) = u_b(x, t) + u'(x, t),$$

где гладкие функции $\rho_b(x, t)$, $u_b(x, t)$ подчиняются уравнениям бездисперсионного (гидродинамического) предела, которые могут быть получены пренебрежением членов с высокими производными от переменных, а малоамплитудные осцилляции $\rho'(x, t)$, $u'(x, t)$ описываются линеаризованными уравнениями на гладком фоне. Ввиду малости длины волны $\sim 2\pi/k$ фон в главном приближении может считаться постоянным, так что мы приходим к линеаризованным уравнениям с постоянными коэффициентами, которые имеют решения в виде гармонических волн

$$\rho', u' \propto \exp[i(kx - \omega t)]$$

с неким законом дисперсии

$$\omega = \omega(k, \rho_b, u_b).$$

Слегка промодулированный пакет линейных волн на малоамплитудном крае ДУВ распространяется по медленно меняющемуся фону с тем же законом дисперсии, удовлетворяющим закону сохранения числа волн (2), но распределения ρ_b, u_b становятся в этом случае медленно меняющимися решениями $\rho = \rho(x, t), u = u(x, t)$ бездисперсионных уравнений (см. [12]). В теории Гуревича–Питаевского [10] малоамплитудный край представлен линейным волновым пакетом и согласно (2) осцилляции входят в область ДУВ на малоамплитудном крае с потоком ω с учетом сдвига Доплера из-за движения края с групповой скоростью

$$v_g = \frac{\partial \omega(k, \rho, u)}{\partial k}.$$

Поэтому число осцилляций в области ДУВ увеличивается со временем как (см. [13, 14])

$$\frac{dN}{dt} = \frac{1}{2\pi} \left| k \frac{\partial \omega}{\partial k} - \omega \right|. \quad (3)$$

Выражение в правой части совпадает с точностью до постоянного множителя с лагранжианом точечной частицы, ассоциированной с малоамплитудным краем ДУВ, если отождествить согласно известной оптико-механической аналогии (см., например, [15]) волновое число k и частоту ω с импульсом и гамильтонианом частицы, соответственно. Тогда число N солитонов, образовавшихся из интенсивного начального импульса, равно механическому действию, произведенному ассоциированной с малоамплитудным краем частицей:

$$N = \frac{S}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} \int (k dx - \omega dt), \quad (4)$$

где $dx = v_g dt$ и интегрирование происходит по всему пути частицы (пакета). Если начальные распределения $\rho_0(x), u_0(x)$ соответствуют однонаправленному волновому распространению в виде простой волны, то между фоновыми распределениями ρ и u имеется функциональная зависимость, отвечающая постоянству одного из бездисперсионных римановых инвариантов [16]. В этом случае волновое число k является функцией локального значения ρ в точке нахождения пакета в данный момент времени: $k = k(\rho)$. Закон дисперсии $\omega = \omega(k, \rho)$ также является функцией от ρ , где $\rho = \rho(x, t)$ — решение уравнения Хопфа

$$\rho_t + V_0(\rho) \rho_x = 0, \quad (5)$$

к которому сводятся бездисперсионные уравнения для простой волны. В результате можно показать, что функция $k = k(\rho)$ является решением уравнения

$$\frac{dk}{d\rho} = \frac{\partial \omega / \partial \rho}{V_0 - \partial \omega / \partial k} \quad (6)$$

с начальным условием

$$k(0) = 0, \quad (7)$$

предполагающим, что опрокидывание импульса происходит в точке с нулевой плотностью $\rho = 0$. Уравнение (6) было впервые получено в работе [17] в результате анализа уравнений Уизема для ДУВ в малоамплитудном пределе, а затем оно было выведено в [18, 19] из уравнений Гамильтона для движения линейных волновых пакетов вдоль фона в виде простой волны. Когда функция $k = k(\rho)$ найдена, можно найти траекторию пакета $x = x(t)$ малоамплитудного края, как это было показано в [20], а затем вычислить интеграл в уравнении (4) для частных примеров нелинейных волновых уравнений (см. [18, 21, 22]). Окончательный результат в этих частных случаях можно записать в форме

$$N = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} k(\rho_0(x)) dx, \quad (8)$$

где $\rho_0(x)$ — начальное распределение переменной ρ . Эта формула еще раньше была получена в работах [23, 24] на основе предположения, что решение уравнений Уизема можно продолжить на гладкую часть импульса таким образом, что полное число осцилляций в ДУВ и на гладкой части остается постоянным во время эволюции импульса. Обобщение этого правила на более общие решения $k = k(\rho, \bar{q})$ уравнения (6), где $\bar{q}$ — постоянная интегрирования, позволяет также найти параметры солитонов в асимптотическом состоянии [24]. Эта теория подтверждается численными решениями нелинейных волновых уравнений и экспериментальными результатами для импульсов, распространяющихся по струе жидкости, текущей в вязкой среде [25].

Целью настоящей работы является распространить этот подход на общий случай волновых импульсов, описываемых двумя переменными $\rho(x, t), u(x, t)$ для систем, допускающих солитонное распространение волн. Мы будем исходить из того, что выражения (4) и (8) можно интерпретировать как частный случай сохранения интегрального инварианта Пуанкаре–Картана [26, 27] для механических систем с фазовым пространством (x, k) и

гамильтонианом $\omega(k, x, t)$. Однако в этом частном случае трубка траекторий, сохраняющих инвариант, определяется решениями гидродинамического уравнения (5), а не решениями уравнений Гамильтона нашей системы. В настоящей работе мы обобщим такое определение инварианта Пуанкаре–Картана на общий случай гидродинамических течений, в которых переменные ρ, u не связаны условием постоянства одного из римановых инвариантов, что приведет к следующему обобщению формулы (8):

$$N = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} k(\rho_0(x), u_0(x), q_N) dx, \quad (9)$$

где $\rho_0(x), u_0(x)$ — начальные распределения двух переменных, а q_N — постоянная интегрирования уравнений, определяющих функцию $k = k(\rho, u)$ от двух переменных. Можно считать, что здесь q_N соответствует N -му солитону в асимптотическом распределении, и тогда нетрудно сопоставить любому n -му солитону в распределении соответствующее значение параметра q_n , определяемое обобщенным правилом квантования Бора–Зоммерфельда, т. е. мы приходим к распространению упомянутого выше метода работ [5–8] на не интегрируемые методом обратной задачи уравнения. Связь параметров q_n с такими физическими характеристиками солитонов как, например, их скорости, устанавливается с помощью замечания Стокса [28, 29] (см. также [18, 30, 31]), что линейные волны и экспоненциально малые хвосты солитонов подчиняются одним и тем же линеаризованным уравнениям, так что выражения для фазовой скорости волны и скорости солитона переходят одно в другое при замене $k \leftrightarrow -i\tilde{k}$, где $\tilde{k}$ — обратная полуширина солитона.

Мы иллюстрируем развитую теорию ее применением к обобщенному нелинейному уравнению Шредингера (НУШ) и подтверждаем ее сравнением с численным расчетом.

2. ИНТЕГРАЛЬНЫЙ ИНВАРИАНТ ПУАНКАРЕ–КАРТАНА И ПРАВИЛО КВАНТОВАНИЯ БОРА–ЗОММЕРФЕЛЬДА

Пусть бездисперсионные уравнения для фонового течения можно записать в форме уравнений газовой динамики

$$\rho_t + (\rho u)_x = 0, \quad u_t + uu_x + \frac{c^2}{\rho} \rho_x = 0, \quad (10)$$

где $c = c(\rho)$ — «скорость звука», связанная с плотностью ρ уравнением состояния $p = p(\rho)$, $c^2 = dp/d\rho$,

где p — давление. Характеристические скорости системы

$$v_+ = u + c, \quad v_- = u - c \quad (11)$$

соответствуют звуковым волнам, распространяющимся вверх и вниз по течению, имеющему скорость u . Уравнения (10) можно преобразовать к диагональной римановой форме

$$\frac{\partial r_+}{\partial t} + v_+ \frac{\partial r_+}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial r_-}{\partial t} + v_- \frac{\partial r_-}{\partial x} = 0, \quad (12)$$

для римановых инвариантов

$$r_{\pm} = \frac{u}{2} \pm \frac{1}{2} \int_0^{\rho} \frac{cd\rho}{\rho}. \quad (13)$$

Если мы подставим сюда функцию $\rho = \rho(c)$, то получим выражения для римановых инвариантов вида

$$r_{\pm} = \frac{u}{2} \pm \sigma(c), \quad \sigma(c) = \frac{1}{2} \int_0^c \frac{c}{\rho(c)} \frac{d\rho}{dc} dc, \quad (14)$$

так что можно использовать c в качестве волновой переменной вместо ρ . Если уравнения (12) решены, то физические переменные u, ρ, c выражаются через римановы инварианты формулами

$$u = r_+ + r_-, \quad \rho = \rho(r_+, r_-), \quad c = c(r_+, r_-). \quad (15)$$

В случае однонаправленного распространения фонового импульса мы имеем дело с простой волной, в которой один из инвариантов Римана постоянен. Пусть импульс распространяется в положительном направлении оси x по покоящейся среде, характеризуемой постоянными значениями

$$\rho = \rho_R, \quad c = c_R, \quad u = u_R = 0.$$

Тогда вдоль такого импульса переменные u и c связаны соотношением

$$u/2 - \sigma(c) = -\sigma(c_R),$$

так что имеется функциональная зависимость $c = c(u)$ и все переменные можно выразить через u , в частности

$$r_+ = u + \sigma(c_R), \quad v_+ = u + c(u) \equiv V_0(u).$$

Следовательно, второе уравнение (12) удовлетворяется тождественно, а первое сводится к уравнению Хопфа

$$\frac{\partial u}{\partial t} + V_0(u) \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \quad (16)$$

Нас интересует распространение малоамплитудного края ДУВ, которое мы отождествляем с движением точечной частицы с координатой $x(t)$ и импульсом $k(t)$, удовлетворяющими уравнениям Гамильтона

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial \omega}{\partial k}, \quad \frac{dk}{dt} = -\frac{\partial \omega}{\partial x}. \quad (17)$$

В обычных ситуациях гамильтониан (закон дисперсии) ω зависит от k, x, t : $\omega = \omega(k, x, t)$. Следуя отличному учебнику [32], мы определяем в расширенном фазовом пространстве (x, k, t) произвольную замкнутую кривую

$$C_0 = \{x = x_0(\eta), k = k_0(\eta), t = t_0(\eta) \mid 0 \leq \eta \leq 1\}, \quad (18)$$

где точки, отвечающие $\eta = 0$ и $\eta = 1$, совпадают друг с другом. Вдоль этой кривой можно вычислить интеграл

$$I_0 = \oint_{C_0} (k \delta x - \omega \delta t), \quad (19)$$

где δx и δt обозначают дифференциалы функций $x = x_0(\eta)$, $t = t_0(\eta)$ в точках контура C_0 . Определим теперь поток в фазовом пространстве уравнениями

$$\frac{dx}{dt} = Q(k, x, t), \quad \frac{dk}{dt} = P(k, x, t), \quad (20)$$

и когда решения этих уравнений пересекают контур C_0 , мы получаем трубку траекторий

$$x = x(t, \eta), \quad k = k(t, \eta), \quad (21)$$

где $x(t_0(\eta), \eta) = x_0(\eta)$, $k(t_0(\eta), \eta) = k_0(\eta)$. Если взять другую функцию $t = t_1(\eta)$, то мы получим другой контур

$$C_1 = \{x = x_1(\eta) = x(t_1(\eta), \eta), \\ k = k_1(\eta) = k(t_1(\eta), \eta), t = t_1(\eta) \mid 0 \leq \eta \leq 1\} \quad (22)$$

и новое значение интеграла (19),

$$I_1 = \oint_{C_1} (k \delta x - \omega \delta t), \quad (23)$$

взятого теперь вдоль контура C_1 , окружающего трубку траекторий, образованных течением (21). Можно спросить, для каких уравнений (20) и соответствующих потоков (21) интегралы (19) и (23) равны друг другу при любом выборе контура C_1 . Как было показано в книгах [26, 27, 32], это условие выполняется, если

$$Q = \frac{\partial \omega}{\partial k}, \quad P = -\frac{\partial \omega}{\partial x}, \quad (24)$$

т.е. поток определяется теми же уравнениями Гамильтона (17). Таким образом, инвариантность интеграла Пуанкаре–Картана

$$I = \oint_C (k \delta x - \omega \delta t) \quad (25)$$

означает, что поток (20) гамильтонов.

Теперь мы посмотрим на инвариантность интеграла (25) с несколько другой точки зрения. Как было указано во Введении, нас интересует инвариантность такого рода интегралов относительно потоков, генерируемых гидродинамическими уравнениями (10) или (16). В этом случае гамильтониан ω зависит от x и t только через посредство решений $\rho = \rho(x, t)$, $u = u(x, t)$ этих уравнений, т.е.

$$\omega = \omega(k, \rho, u), \quad (26)$$

а поток генерируется уравнением

$$\frac{dx}{dt} = u(x, t). \quad (27)$$

Тогда инвариантность интеграла (25) накладывает определенные условия на предполагаемую зависимость импульса (волнового числа) k от фоновых переменных

$$k = k(\rho, u). \quad (28)$$

Если условие инвариантности выполнено, то действие (4) может быть сведено к обобщенному правилу квантования Бора–Зоммерфельда (9), дающему необходимую информацию о параметрах солитонов в асимптотическом состоянии. Мы рассмотрим условие инвариантности интеграла (25) по отдельности для простых волн (16) и для общих решений уравнений (10),

2.1. Импульс в виде простой волны

В случае простой волны малоамплитудный край ДУВ распространяется по фону, описываемому единственной переменной $u = u(x, t)$, эволюция которой подчиняется уравнению Хопфа (16). Нам известен закон дисперсии $\omega = \omega(k, u)$ линейных волн и мы ищем такую функцию $k = k(u)$, что интеграл Пуанкаре–Картана (25) имеет одно и то же значение для любого контура C вокруг трубки траекторий, генерируемых течением $dx/dt = V_0(u)$. Следуя книге [32], мы вводим координату μ вдоль образующих трубки и предполагаем, что эта координата связана с потоком соотношениями

$$\frac{dx}{V_0(u)} = dt = \chi d\mu, \quad (29)$$

где $\chi = \chi(t, x, k)$ — произвольная функция. Для фиксированного значения $\mu = \text{const}$ мы получаем на каждой линии тока некую точку, которые все вместе образуют контур вокруг трубки. В результате интеграл (25), вообще говоря, становится функцией от μ , но мы хотим найти такую функцию $k = k(u)$, что этот интеграл перестает зависеть от μ при любом выборе функции χ . Дифференцирование формулы (25) по μ дает

$$dI = \oint \left\{ \left[\frac{dk}{du} \delta x - \left(\frac{\partial \omega}{\partial k} \frac{dk}{du} + \frac{\partial \omega}{\partial u} \right) \delta t \right] \times \right. \\ \left. \times \left(\frac{\partial u}{\partial t} dt + \frac{\partial u}{\partial x} dx \right) - \delta x \cdot dx + \delta \omega \cdot dt \right\} = 0, \quad (30)$$

где мы проинтегрировали члены $k d\delta x - \omega d\delta t$ по частям вокруг замкнутого контура. Теперь мы подставляем

$$dx = V_0 \chi d\mu, \quad dt = \chi d\mu$$

и получаем после простых преобразований с учетом уравнения (16) выражение

$$\oint \left[\left(\frac{\partial \omega}{\partial k} - V_0 \right) \frac{dk}{du} + \frac{\partial \omega}{\partial u} \right] \chi \left(\frac{\partial u}{\partial t} \delta t + \frac{\partial u}{\partial x} \delta x \right) = 0.$$

Этот интеграл должен обращаться в нуль при любом выборе χ , так что мы получаем уравнение

$$\frac{dk}{du} = \frac{\partial \omega / \partial u}{V_0(u) - \partial \omega / \partial k}. \quad (32)$$

Как уже было указано выше, это уравнение было получено ранее из анализа уравнений Уизема для малоамплитудного края ДУВ в [17] и из уравнений Гамильтона для движения волновых пакетов вдоль фоновой простой волны в [18, 19]. Представленный здесь вывод дает новую информацию о сохранении интеграла Пуанкаре–Картана (25) фоновым течением простой волны.

Предположим теперь, что мы нашли такое решение

$$k = k(u, \bar{q}), \quad (33)$$

($\bar{q}$ — постоянная интегрирования) уравнения (32), что контур C отвечает пройденному дважды пути малоамплитудного края, распространяющемуся согласно уравнениям Гамильтона (17) с отрицательным импульсом k в одном направлении и с положительным импульсом в другом. Тогда мы можем определить «число колебаний»

$$N(\bar{q}) = \frac{1}{4\pi} \oint_{C(\bar{q})} (k \delta x - \omega \delta t) \quad (34)$$

в ДУВ, отвечающее этому значению $\bar{q}$ (дополнительный множитель $1/2$ по сравнению с формулой (4) введен из-за двукратного прохождения пути края по замкнутому контуру). Это число $N(\bar{q})$ остается тем же самым, когда мы деформируем контур к начальному состоянию при $t = 0$ ($\delta t = 0$):

$$N(\bar{q}) = \frac{1}{4\pi} \oint_{C_0(\bar{q})} k \delta x = \frac{1}{2\pi} \int_{x_1(\bar{q})}^{x_2(\bar{q})} k(u_0(x), \bar{q}) dx, \quad (35)$$

где $x_{1,2}(\bar{q})$ — «точки поворота», в которых

$$k(u_0(x_{1,2}(\bar{q})), \bar{q}) = 0 \quad (36)$$

и $u_0(x)$ — начальное распределение волновой переменной.

Асимптотическое выражение (8) для числа солитонов предполагает, что точки поворота ушли на бесконечность, а значение интеграла округлено до целого. Но при менее формальном рассмотрении естественно предположить, что существует такое максимальное целое значение N , для которого выражение (35) с заданным распределением $u_0(x)$ еще имеет соответствующее «собственное значение» $\bar{q}_N$, тогда как для $N + 1$ такого собственного значения больше не существует. В этом случае интервал интегрирования $(x_1(\bar{q}_N), x_2(\bar{q}_N))$ настолько широк для достаточного интенсивного начального импульса с $u_0(x) \rightarrow 0$ при $|x| \rightarrow \infty$, что его с достаточной точностью можно заменить на интервал $(-\infty, \infty)$. Можно сказать, что $\bar{q}_N$ соответствует N -му солитону в асимптотическом состоянии. Если уменьшить N на единицу, то мы получим $N(\bar{q}_{N-1}) = N - 1$, т. е. $\bar{q}_{N-1}$ соответствует $(N - 1)$ -му солитону, и, продолжая в том же духе, мы устанавливаем соответствие между n -м солитоном и параметром $\bar{q}_n$, определяемым правилом квантования Бора–Зоммерфельда

$$\int_{x_1(\bar{q}_n)}^{x_2(\bar{q}_n)} k(u_0(x), \bar{q}_n) dx = 2\pi n, \quad n = 1, 2, \dots, N, \quad (37)$$

где $k = k(u, \bar{q})$ — решение (33) уравнения (32). Наконец мы замечаем, что формулу (37) можно интерпретировать как квазиклассическое правило квантования для собственных значений линейного волнового уравнения для волн, распространяющихся вдоль потенциала $u_0(x)$. Как хорошо известно из квантовой механики (см., например, [33]), более аккуратное описание волн вблизи точек поворота ведет к замене $n \mapsto n + 1/2$, и это является очень общим явлением в теории коротковолновых асимптотик $k \rightarrow \infty$ (см., например, Приложение 11 в книге

[34]). Мы будем делать такую замену в практических приложениях теории, оправдывая ее сравнением с численными результатами.

Мы свяжем параметры $\bar{q}_n$, полученные из правила Бора–Зоммерфельда (37), с физическими параметрами асимптотических солитонов в следующем параграфе, а теперь обратимся к обобщению этого правила квантования на общие решения гидродинамических уравнений.

2.2. Общая форма фонового импульса

Пусть бездисперсионное течение описывается решением $\rho = \rho(x, t)$, $u = u(x, t)$ уравнений (10) с начальными распределениями $\rho = \rho_0(x)$, $u = u_0(x)$. Закон дисперсии в уравнениях Гамильтона (17) для движения пакета зависит от значений ρ и u в точке x нахождения малоамплитудного края в момент времени t , так что функция

$$\omega = \omega(k, \rho, u) \quad (38)$$

нам известна из линеаризованных уравнений волновой динамики. Мы снова ищем такую функцию $k = k(\rho, u)$, что интеграл Пуанкаре–Картана (25) сохраняется течением в расширенном фазовом пространстве (x, k, t) при условии, что контур C окружает трубку линий тока, определяемых уравнением $dx/dt = u(x, t)$. Как и в случае простой волны, мы определяем координату μ вдоль линий тока уравнениями

$$\frac{dx}{u} = dt = \chi d\mu, \quad (39)$$

где $\chi = \chi(x, t, k)$ — произвольная функция, и требуем, чтобы интеграл не зависел ни от выбора функции χ (т. е. от выбора формы контура), ни от μ (т. е. положения контура на трубке). Дифференцирование формулы (25) по μ дает с учетом уравнений (10) и (17) выражение

$$dI = \oint \left\{ \left[\frac{\partial k}{\partial \rho} \left(\frac{\partial \omega}{\partial k} - u \right) - \frac{c^2}{\rho} \frac{\partial k}{\partial u} + \frac{\partial \omega}{\partial \rho} \right] \rho_x + \left[\frac{\partial k}{\partial u} \left(\frac{\partial \omega}{\partial k} - u \right) - \rho \frac{\partial k}{\partial \rho} + \frac{\partial \omega}{\partial u} \right] u_x \right\} \times \\ \times (\delta x - u \delta t) \chi \cdot d\mu = 0. \quad (40)$$

Ввиду произвольности χ выражение в фигурных скобках должно быть равно нулю. Более того, выражения в квадратных скобках являются функциями только от ρ и u , тогда как локальные значения производных ρ_x и u_x зависят от выбора начальных условий и в этом смысле также могут рассматриваться

как произвольные функции. Поэтому выражения в квадратных скобках должны обращаться в нуль по отдельности и мы приходим к уравнениям

$$\frac{\partial k}{\partial \rho} = \frac{(v_g - u) \frac{\partial \omega}{\partial \rho} + \frac{c^2}{\rho} \frac{\partial \omega}{\partial u}}{c^2 - (v_g - u)^2}, \quad (41)$$

$$\frac{\partial k}{\partial u} = \frac{(v_g - u) \frac{\partial \omega}{\partial u} + \rho \frac{\partial \omega}{\partial \rho}}{c^2 - (v_g - u)^2},$$

которые должны определять функцию $k = k(\rho, u)$ при данном законе дисперсии (38) и уравнении состояния $c = c(\rho)$. Уравнения (41) были также выведены недавно в работе [35] из уравнений Гамильтона (17) для движения пакета при том же предположении, что k является только функцией переменных ρ и u .

Для существования функции $k = k(\rho, u)$ ее производные, определяемые формулами (41), должны удовлетворять условию совместности

$$\frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{\partial k}{\partial u} \right) = \frac{\partial}{\partial u} \left(\frac{\partial k}{\partial \rho} \right). \quad (42)$$

Если это условие не удовлетворяется тождественно, то мы можем ограничиться пределом больших значений k , поскольку именно этот предел соответствует большим квантовым числам в правиле квантования Бора–Зоммерфельда. Для этого мы раскладываем правые части уравнений (41) по степеням малого параметра $\sim c/k$ и получаем

$$\frac{\partial k}{\partial \rho} = R_1(k, \rho, u), \quad \frac{\partial k}{\partial u} = R_2(k, \rho, u), \quad (43)$$

где в $R_{1,2}$ оставлены лишь члены, удовлетворяющие условию (42). Полученные уравнения позволяют найти приближенное выражение для функции

$$k = k(\rho, u, q), \quad (44)$$

где q — постоянная интегрирования, определяемая начальным значением $k = k_0 \gg c$. Удобно определить q так, чтобы условие $k \sim k_0 \gg c$ соответствовало условию $q \gg c$.

Решение (44) (точное или приближенное) позволяет определить интеграл Пуанкаре–Картана

$$N(q) = \frac{1}{4\pi} \oint_C (k \delta x - \omega \delta t) \quad (45)$$

для контура C вокруг трубки линий тока гидродинамического течения. Если мы деформируем контур к начальному моменту $t = 0$, то получим

$$N(q) = \frac{1}{4\pi} \oint_{C_0(q)} k \delta x = \frac{1}{2\pi} \int_{x_1(q)}^{x_2(q)} k[\rho_0(x), u_0(x), q] dx, \quad (46)$$

где $x_{1,2}(q)$ — точки поворота, определяемые уравнением

$$k[\rho_0(x_{1,2}(q), u_0(x_{1,2}(q)), q)] = 0. \quad (47)$$

Если нам известно только асимптотическое решение при $k \gg c$ уравнений (43), то (47) также дает приближенные значения для координат точек поворота. Тем не менее формула (46) дает достаточно точное значение для интеграла, так как вдоль почти всего интервала интегрирования мы имеем $k \gg c$ и окрестности точек поворота дают относительно небольшой вклад в интеграл. Как и в случае простой волны, мы устанавливаем соответствие между номерами солитонов n и значениями параметра q_n , которые определяются правилом квантования Бора–Зоммерфельда

$$\int_{x_1(q_n)}^{x_2(q_n)} k[\rho_0(x), u_0(x), q_n] dx = 2\pi n, \quad n = 1, 2, \dots, N. \quad (48)$$

В конкретных приложениях этой формулы мы будем делать замену $n \mapsto n + 1/2$, как это было пояснено ниже уравнения (37).

Теперь мы должны связать параметры $\bar{q}_n$ (случай простой волны) или q_n (общий случай) с параметрами асимптотических солитонов, на которые распадается изначально плавный интенсивный импульс.

3. ПАРАМЕТРЫ АСИМПТОТИЧЕСКИХ СОЛИТОНОВ

Теперь, когда каждый солитон в асимптотическом состоянии помечен параметром $\bar{q}_n$ или q_n , нам нужно связать их с физическими параметрами солитона, в частности, с его скоростью V_n . Это можно сделать, используя замечание Стокса [28, 29] (см. также [30, 31]), что экспоненциально малые хвосты солитонов $\propto \exp[\pm \tilde{k}(x - Vt)]$ подчиняются тем же самым линеаризованным уравнениям, что и малоамплитудные гармонические волны $\propto \exp[i(kx - \omega t)]$. Следовательно, скорость солитона V_n выражается формулой

$$V_n = \tilde{\omega}(\tilde{k}_n)/\tilde{k}_n, \quad \text{где} \quad \tilde{\omega}(\tilde{k}) = i\omega(-i\tilde{k}), \quad (49)$$

где $\tilde{k}$ обозначает обратную полуширину солитона (см. [17, 18, 21]). Это означает аналитическое продолжение функции $\omega = F(k^2)$ из области положительных значений ее аргумента k^2 в область отрицательных его значений $k^2 = -\tilde{k}^2 < 0$. На практике это

означает, что мы рассматриваем одну и ту же функцию F в различных интервалах ее аргумента k^2 .

Мы обобщаем это наблюдение Стокса на другие функции от k^2 , которые могут быть продолжены в область $k^2 < 0$, где они превращаются в некие соотношения для обратной полуширины солитонов $\tilde{k}$. Например, пусть мы нашли точное решение (33) уравнения (32), которое может быть выражено формулой

$$k^2 = \bar{K}(u, \bar{q}). \quad (50)$$

Ее продолжение в солитонную область дает

$$\tilde{k}^2 = -\bar{K}(u, \bar{q}). \quad (51)$$

Пусть мы нашли из правила Бора–Зоммерфельда значение $\bar{q}_n$ для n -го солитона и пусть при асимптотически больших временах этот солитон движется по нулевому фону $u = 0$. Тогда его обратная полуширина будет даваться формулой

$$\tilde{k}_n^2 = -\bar{K}(0, \bar{q}_n) \quad (52)$$

и, следовательно, его скорость легко может быть найдена с помощью формулы (49). Этот подход воспроизводит в другой форме теорию, развитую для импульсов в виде простых волн в работах [24, 25].

Этот подход непосредственным образом распространяется на случаи, когда известно точное решение уравнений (41), что подразумевает выполнение условия (42). Опять мы выражаем точное решение в форме

$$k^2 = K(\rho, u, q) \quad (53)$$

и продолжаем его аналитически в солитонную область, получая соотношение

$$\tilde{k}^2 = -K(\rho, u, q). \quad (54)$$

Если для n -го солитона правило Бора–Зоммерфельда (48) дает значение q_n , а асимптотический солитон распространяется по фону с параметрами $\rho = \rho_R, u = 0$, то его обратная полуширина будет даваться формулой

$$\tilde{k}_n^2 = -K(\rho_R, 0, q_n), \quad (55)$$

а его скорость будет определяться правилом Стокса (49).

Однако такое непосредственное аналитическое продолжение становится невозможным, если нам известно только асимптотическое решение (44), справедливое лишь при $k \gg c \sim u$. Тем не менее эту трудность можно обойти следующим образом. Пусть асимптотическое решение представлено

в форме (53). Естественно, это общее решение остается справедливым и в случае простых волн, когда имеется функциональная связь между ρ и u , скажем, $\rho = \rho_{\text{sw}}(u)$, так что мы получаем асимптотическую формулу

$$k^2 = K(\rho_{\text{sw}}(u), u, q), \quad k \gg u. \quad (56)$$

Асимптотические солитоны распространяются вдоль простых волн, на которые расщепился начальный импульс, так что его обратные полуширины представляются конкретизацией формулы (51), полученной аналитическим продолжением формулы (50). Если же мы возьмем ее разложение в ряд по степеням малого параметра u , то получающаяся формула

$$k^2 = \bar{K}_{\text{asympt}}(u, \bar{q}) \quad (57)$$

должна согласовываться с формулой (56). Это условия «спивания» двух выражений в области их совместной справедливости позволяет найти соотношение между параметрами q и $\bar{q}$:

$$\bar{q} = \bar{q}(q). \quad (58)$$

Следовательно, обратные полуширины асимптотических солитонов даются выражением (52),

$$\tilde{k}_n^2 = -\bar{K}(0, \bar{q}(q_n)), \quad (59)$$

где параметры q_n получены из правила Бора–Зоммерфельда (48) и мы снова предположили, что асимптотические солитоны распространяются по фону с $u = 0$. Наконец, скорости солитонов находим опять с помощью правила Стокса (49).

Проиллюстрируем развитую теорию примерами.

4. СОЛИТОНЫ, ОБРАЗУЮЩИЕСЯ В ТЕОРИИ ОБОБЩЕННОГО НУШ

Здесь мы рассмотрим эволюцию начального импульса в теории обобщенного дефокусирующего НУШ (обобщенного уравнения Гросса–Питаевского для бозе–эйнштейновского конденсата с отталкивающим взаимодействием между атомами)

$$i\psi_t + \frac{1}{2}\psi_{xx} - f(|\psi|^2)\psi = 0, \quad (60)$$

где функция нелинейности положительна: $f(\rho) > 0$, $f(0) = 0$. Хорошо известно, что подстановка

$$\psi = \sqrt{\rho} \exp \left(i \int^x u(x', t) dx' \right) \quad (61)$$

переводит это уравнение в систему

$$\begin{aligned} \rho_t + (\rho u)_x &= 0, \\ u_t + uu_x + \frac{c^2}{\rho} \rho_x + \left(\frac{\rho_x^2}{8\rho^2} - \frac{\rho_{xx}}{4\rho} \right)_x &= 0, \end{aligned} \quad (62)$$

где

$$c^2 = \rho f'(\rho). \quad (63)$$

Линеаризация этой системы относительно однородного состояния дает закон дисперсии Боголюбова для линейных волн,

$$\omega = k \left(u \pm \sqrt{c^2 + \frac{k^2}{4}} \right), \quad (64)$$

т. е. c является скоростью звука в бездисперсионном пределе $k \rightarrow 0$. Уравнения (62) сводятся в этом же пределе к стандартным уравнениям Эйлера (10).

Теперь мы можем проверить, удовлетворяют ли производные (41) условию совместности. В этом случае удобно заменить ρ на переменную c , где функция $\rho = \rho(c)$ получается обращением функции $c = c(\rho)$ (см. (63)), так что уравнения (41) приобретают вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial k}{\partial c} &= -\frac{c[(2 + c\rho'/\rho)k^2 + 4(1 + c\rho'/\rho)c^2]}{k(k^2 + 3c^2)}, \\ \frac{\partial k}{\partial u} &= -\frac{\sqrt{k^2 + 4c^2}[k^2 + 2(1 + \rho/(c\rho'))c^2]}{k(k^2 + 3c^2)}. \end{aligned} \quad (65)$$

Вычисление дает (см. также [35])

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial c} \left(\frac{\partial k}{\partial u} \right) - \frac{\partial}{\partial u} \left(\frac{\partial k}{\partial c} \right) &= \frac{\sqrt{k^2 + 4c^2}}{k\rho\rho'(k^2 + 3c^2)^2} \times \\ &\times \left[(k^2 + 6c^2)\rho'^2(\rho' - 2c) + 2(k^2 + 3c^2)\rho^2(c\rho'' - \rho') \right], \end{aligned} \quad (66)$$

и мы видим, что условие совместности удовлетворяется только для нелинейности керровского типа с $f(\rho) = \rho$ и $\rho = c^2$. В остальных случаях оно выполняется только асимптотически в пределе $k \rightarrow \infty$, так что удобно рассмотреть эти две ситуации по отдельности.

4.1. Нелинейность вида $f(\rho) = \rho$

НУШ с нелинейностью Керра является полностью интегрируемым уравнением [9], так что правило квантования Бора–Зоммерфельда для солитонов может быть выведено из рассмотрения линейной спектральной задачи Захарова–Шабата [7, 8].

Почувствительно увидеть, как эти известные результаты могут быть получены нашим методом, не опирающимся на полную интегрируемость этого уравнения. Мы предположим, что начальный импульс имеет форму ямы в распределении $c = c_0(x)$ и, кроме того, имеется некое начальное распределение скорости течения $u = u_0(x)$. Вдали от импульса имеем $c_0(x) \rightarrow c_R$, $u_0(x) \rightarrow 0$ при $|x| \rightarrow \infty$. Естественно, эти два распределения эквивалентны некоторым начальным распределениям бездисперсионных римановых инвариантов $r_{\pm}^{(0)}(x)$ (см. (14))

$$r_{\pm} = \frac{u}{2} \pm c. \quad (67)$$

В этом случае с $\rho = c^2$ уравнения (65) могут быть написаны в форме

$$\frac{\partial k}{\partial c} = -4\frac{c}{k}, \quad \frac{\partial k}{\partial u} = -\frac{\sqrt{k^2 + 4c^2}}{k}, \quad (68)$$

и они имеют точное решение

$$k^2 = (q - u)^2 - 4c^2, \quad (69)$$

где q — постоянная интегрирования. Если написать это решение в виде

$$k^2 = 4\left(\frac{q}{2} - \frac{u}{2} - c\right)\left(\frac{q}{2} - \frac{u}{2} + c\right) = 4(\lambda - r_+)(\lambda - r_-), \quad (70)$$

где мы определили $\lambda = q/2$, то правило Бора–Зоммерфельда (48) гласит

$$\int_{x_1(\lambda_n)}^{x_2(\lambda_n)} \sqrt{(\lambda_n - r_+^{(0)}(x))(\lambda_n - r_-^{(0)}(x))} dx = n\pi, \quad (71)$$

$$n = 1, 2, \dots, N.$$

Эта формула совпадает с асимптотической формулой для собственных значений линейной спектральной задачи (см. [7, 8]) с точностью до замены n на $n + 1/2$, как это уже было отмечено ниже уравнения (37).

Поскольку выражение (69) представляет точное решение уравнений (68), оно справедливо для любых значений k и может быть продолжено в солитонную область, так что мы получаем

$$\tilde{k}^2 = -4(\lambda - r_+)(\lambda - r_-). \quad (72)$$

В асимптотической области, когда солитоны распространяются по однородному фону со значениями римановых инвариантов $r_{\pm} = \pm c_R$, мы находим для обратной полуширины n -го солитона выражение

$$\tilde{k}_n^2 = 4(c_R^2 - \lambda_n^2).$$

Следовательно, согласно правилу Стокса (49), скорость солитона равна

$$V_n = \frac{\tilde{\omega}(\tilde{k}_n)}{\tilde{k}_n} = \sqrt{c_R^2 - \frac{\tilde{k}^2}{4}} = \lambda_n \quad (73)$$

в согласии с известными результатами (см., например, [8]).

Возможность найти в этом случае точное решение уравнений (65) связана, по-видимому, с полной интегрируемостью НУШ (60) с нелинейностью Керра $f(\rho) = \rho$. Мы обсудим эту связь с интегрируемостью в разделе 5.

4.2. Не керровская нелинейность

В пределе больших $k \gg c$ правая сторона уравнения (66) стремится к нулю как $\propto k^{-2}$, т.е. условие (42) выполняется в этом пределе и мы можем найти асимптотическое выражение для функции $k = k(c, u)$. Уравнения (65) в пределе больших k приобретают вид

$$\frac{\partial k^2}{\partial c^2} = -2\left(1 + \frac{c^2}{\rho} \frac{d\rho}{dc^2}\right), \quad \frac{\partial k}{\partial u} = -1. \quad (74)$$

Второе уравнение дает

$$k = q - u + F(c^2),$$

где в главном приближении

$$k \approx q \sim k_0 \gg |u|, c.$$

Мы предполагаем, что

$$F(c^2) \sim c^2,$$

так что

$$k^2 \approx (q - u)^2 + 2qF(c^2),$$

где мы пренебрегли малыми членами $uF \sim c^3$ и $F^2 \sim c^4$. Тогда первое уравнение (74) дает

$$F(c^2) = -\frac{1}{q} \left(c^2 + \int_0^{\rho(c)} \frac{c^2}{\rho} d\rho \right) \sim \frac{c^2}{q}$$

в согласии с нашим предположением о порядке малости F . В результате мы получаем асимптотическое решение

$$k^2 = (q - u)^2 - 2 \left(c^2 + \int_0^{\rho(c)} \frac{c^2}{\rho} d\rho \right). \quad (75)$$

Для частного случая функции нелинейности

$$f(\rho) = \frac{1}{\gamma-1} \rho^{\gamma-1}, \quad \text{когда} \quad c^2 = \rho^{\gamma-1}, \quad \rho = c^{2/(\gamma-1)}, \quad (76)$$

находим

$$k^2 = (q-u)^2 - \frac{2\gamma}{\gamma-1} c^2. \quad (77)$$

Если $\gamma = 2$, т.е. $f(\rho) = \rho$, асимптотическая формула воспроизводит точное решение (69). Функция $k = k(c, u)$, определенная формулой (77), может быть использована в правиле Бора–Зоммерфельда (48), так что мы находим

$$\int_{x_1(q_n)}^{x_2(q_n)} \sqrt{(q_n - u_0(x))^2 - \frac{2\gamma}{\gamma-1} c_0^2(x)} dx = \quad (78)$$

$$= 2\pi \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 1, 2, \dots, N,$$

где мы сделали также замену $n \mapsto n + 1/2$. В результате мы получаем набор значений параметра q_n для солитонов, образующихся из начального импульса с заданными начальными распределениями $c = c_0(x)$, $u = u_0(x)$. Чтобы связать q_n со скоростями солитонов, мы должны сшить наше решение с точным решением уравнения (32) для импульса в виде простой волны.

Задача об эволюции начального разрыва простой волны в виде ступеньки была детально изучена в работе [36] методом работы [17]. Найденное там решение уравнения (32) может быть написано в наших обозначениях в форме

$$k^2 = 4c^2(\alpha^2(c, \bar{q}) - 1), \quad (79)$$

где функция $\alpha = \alpha(c, \bar{q})$ определяется неявно выражением

$$\frac{c}{\bar{q}} = \left(\frac{2}{1+\alpha} \right)^{\frac{\gamma-1}{3\gamma-5}} \left(\frac{\gamma+1}{3-\gamma+2(\gamma-1)\alpha} \right)^{\frac{2(\gamma-2)}{3\gamma-5}}. \quad (80)$$

В пределе $c \ll \bar{q}$ имеем $\alpha \gg 1$, так что получаем разложение

$$\frac{c}{\bar{q}} = \beta(\gamma) \left(\frac{1}{\alpha} - \frac{1}{\gamma-1} \cdot \frac{1}{\alpha^2} + \frac{\gamma^2-3\gamma+6}{4(\gamma-1)^2} \cdot \frac{1}{\alpha^3} + \dots \right), \quad (81)$$

где

$$\beta(\gamma) = 2^{\frac{3-\gamma}{3\gamma-5}} \left(\frac{\gamma+1}{\gamma-1} \right)^{\frac{2(\gamma-2)}{3\gamma-5}}. \quad (82)$$

Обращение этого ряда и подстановка результата в формулу (79) дают с необходимой точностью

$$k^2 \approx (2\bar{q}\beta)^2 - \frac{4}{\gamma-1} (2\bar{q}\beta)c + \left(\frac{4}{(\gamma-1)^2} - \frac{2}{\gamma-1} - 2 \right) c^2, \quad c \ll \bar{q}. \quad (83)$$

Это асимптотическое выражение должно совпадать с формулой (77) для импульсов в виде простой волны.

Бездисперсионные римановы инварианты (14) в нашем случае (76) равны

$$r_{\pm} = \frac{u}{2} \pm \frac{c}{\gamma-1}. \quad (84)$$

Рассмотрим распространяющиеся вправо солитоны, движущиеся по фону с

$$r_- = \frac{u}{2} - \frac{c}{\gamma-1} = -\frac{c_R}{\gamma-1} = \text{const},$$

где $c \rightarrow c_R$, $u \rightarrow 0$ при $|x| \rightarrow \infty$. Тогда мы должны подставить

$$u = \frac{2}{\gamma-1} (c - c_R) \quad (85)$$

в уравнение (77) и получить

$$k^2 = \left(q + \frac{2c_R}{\gamma-1} \right)^2 - \frac{4}{\gamma-1} \left(q + \frac{2c_R}{\gamma-1} \right) c + \left(\frac{4}{(\gamma-1)^2} - \frac{2}{\gamma-1} - 2 \right) c^2, \quad c \ll q. \quad (86)$$

Это выражение совпадает с (83) при

$$\bar{q} = \frac{1}{2\beta} \left(q + \frac{2c_R}{\gamma-1} \right). \quad (87)$$

В солитонной области формула (79) дает

$$\tilde{k}^2 = 4c^2(1 - \alpha^2(c, \bar{q})), \quad (88)$$

так что скорости асимптотических солитонов, движущихся по однородному покоящемуся фону с $c = c_R$, $u = 0$, равны

$$V_n = \frac{\tilde{\omega}(\tilde{k}_n)}{\tilde{k}_n} = \sqrt{c_R^2 - \frac{\tilde{k}_n^2}{4}} = c_R \alpha \left(c_R, \frac{1}{2\beta} \left(q_n + \frac{2c_R}{\gamma-1} \right) \right), \quad (89)$$

где q_n находятся из правила квантования Бора–Зоммерфельда (78).

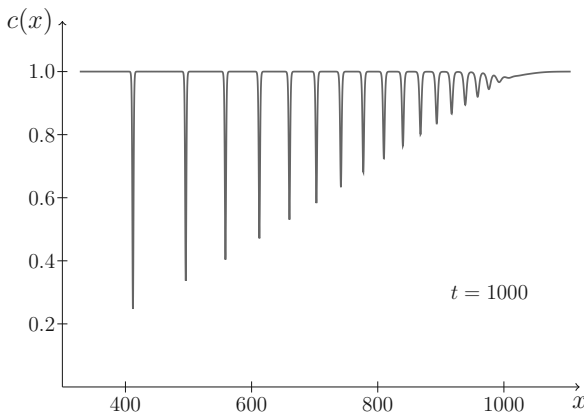


Рис. 1. Распределение $c(x)$ для распространяющихся вправо солитонов, которые были образованы при эволюции импульса с начальными распределениями (93); время эволюции $t = 1000$

Скорость солитона V связана с минимальной плотностью ρ_m в центре темного солитона соотношением (см. [37])

$$V^2 = \frac{2\rho_m}{(\rho_R - \rho_m)^2} \int_{\rho_m}^{\rho_R} [f(\rho_R) - f(\rho)] d\rho, \quad (90)$$

так что когда найдена скорость солитона, то нетрудно найти его амплитуду.

Мы проиллюстрируем теорию конкретным примером с $\gamma = 3$, когда $\beta = \sqrt{2}$ и функция $\alpha = \alpha(c)$ может быть найдена в явном виде (см. [36]):

$$\alpha(c, \bar{q}) = \frac{1}{2} \left(\sqrt{1 + 8 \left(\frac{\bar{q}}{c} \right)^2} - 1 \right). \quad (91)$$

В результате получаем простую формулу для скорости

$$V_n = \frac{1}{2} \left(\sqrt{c_R^2 + (c_R + q_n)^2} - c_R \right). \quad (92)$$

Мы сравнили наши аналитические предсказания с результатами численного решения обобщенного НУШ (60) с $f(\rho) = \rho^2/2$ ($\gamma = 3$) для начальных распределений

$$c_0(x) = 1 - \frac{0.9}{\text{ch}^2(x/20)}, \quad u_0(x) = 0. \quad (93)$$

В этом случае начальный импульс превращается в две симметричные последовательности темных солитонов, движущихся вправо и влево, и типичное

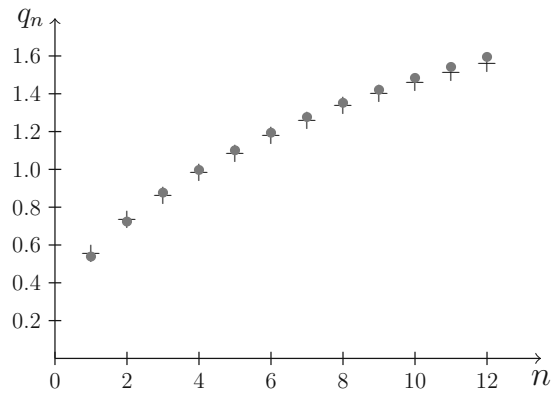


Рис. 2. Параметры $q_n^{\text{Б-З}}$, полученные из правила Бора–Зоммерфельда (крестики), и $q_n^{\text{числ}}$, полученные из численного решения обобщенного НУШ (точки)

распределение $c(x)$ при времени эволюции $t = 1000$ показано на рис. 1 для движущихся вправо солитонов. Если предположить, что все эти солитоны начали свое движение в точке $x = 0$ в момент времени $t = 0$ сразу с асимптотической скоростью V_n , то их координаты в момент t будут равны

$$x_n(t) = t(\sqrt{1 + (1 + q_n)^2} - 1)/2.$$

Эта формула позволяет найти значения q_n из численных значений координат:

$$q_n^{\text{числ}} = \sqrt{(2x_n(t)/t + 1)^2 - 1} - 1. \quad (94)$$

Полученные таким образом значения можно сравнить со значениями $q_n^{\text{Б-З}}$, найденными из правила Бора–Зоммерфельда (78) в частном случае начальных распределений (93), и результаты такого сравнения показаны на рис. 2, где крестики соответствуют $q_n^{\text{Б-З}}$, а точки численному расчету $q_n^{\text{числ}}$. Как легко видеть, согласие очень хорошее даже для небольших номеров n .

В случае $f(\rho) = \rho^2/2$ формула (90) дает следующее выражение для минимума плотности в центре n -го солитона

$$\rho_m^{(n)} = \left[\rho_R^2 + \frac{3}{4} \left(\sqrt{\rho_R^2 + (q_n + \rho_R)^2} - \rho_R \right)^2 \right]^{1/2} - \rho_R. \quad (95)$$

Эта формула также хорошо согласуется с минимальными значениями плотности в центрах солитонов, показанных на рис. 1.

5. СВЯЗЬ С ТЕОРИЕЙ ПОЛНОСТЬЮ ИНТЕГРИРУЕМЫХ УРАВНЕНИЙ

Как мы видели в предыдущем разделе, есть существенная разница между случаями с $\gamma = 2$ и $\gamma \neq 2$: если $\gamma = 2$, то производные (65) коммутируют и мы получаем точное решение (69) этих уравнений, тогда как если $\gamma \neq 2$, то мы можем получить только асимптотическое решение (77), справедливое в пределе $q \gg |u|$, с. Представляется очень правдоподобным, что такая разница связана с полной интегрируемостью НУШ (60) с $f(\rho) = \rho$, ($\gamma = 2$). Здесь мы обсудим эту связь для класса полностью интегрируемых уравнений, принадлежащих схеме Абловица-Каупа-Ньюэлл-Сигура (АКНС) [38].

Обычно схема АКНС формулируется в матричной форме, но для обсуждения ее квазиклассического предела удобно перейти к скалярной форме (см. [39]). Предположим, что рассматриваемое интегрируемое уравнение может быть записано как условие совместности двух линейных уравнений

$$\phi_{xx} = \mathcal{A}\phi, \quad \phi_t = -\frac{1}{2}\mathcal{B}_x\phi + \mathcal{B}\phi_x \quad (96)$$

для функции ϕ , где $\mathcal{A}$ и $\mathcal{B}$ зависят от волновых переменных (пусть это будут ρ и u) и от спектрального параметра λ . Условие совместности

$$(\phi_{xx})_t = (\phi_t)_{xx}$$

приводит к уравнению

$$\mathcal{A}_t - 2\mathcal{B}_x\mathcal{A} - \mathcal{B}\mathcal{A}_x + \frac{1}{2}\mathcal{B}_{xx} = 0, \quad (97)$$

которое должно выполняться при любых значениях λ , так что в результате мы получаем систему уравнений для ρ и u . Возможность представления (96) дает множество полезных соотношений для решений нелинейных уравнений. В частности, первое уравнение (96) второго порядка имеет два базисных решения ϕ_+ , ϕ_- , с помощью которых мы определяем функцию

$$g = \phi_+\phi_-, \quad (98)$$

которая удовлетворяет уравнениям

$$g_{xxx} - 2\mathcal{A}_xg - 4\mathcal{A}g_x = 0, \quad g_t = \mathcal{B}g_x - \mathcal{B}_xg. \quad (99)$$

Первое из них легко интегрируется, что дает

$$\frac{1}{2}gg_{xx} - \frac{1}{4}g_x^2 - \mathcal{A}g^2 = P, \quad (100)$$

где P — постоянная интегрирования. Тогда с помощью второго уравнения (99) находим

$$\left(\frac{\sqrt{P}}{g}\right)_t = \left(\frac{\sqrt{P}}{g}\mathcal{B}\right)_x, \quad (101)$$

где мы поместили постоянный множитель $\sqrt{P}$ под знаки дифференцирования, чтобы фиксировать асимптотическое поведение g при $\lambda \rightarrow \infty$. Уравнение (101) может служить производящей функцией законов сохранения наших нелинейных уравнений и усреднение этой производящей функции по быстрым колебаниям в волне дает удобный метод вывода модуляционных уравнений Уизема [40, 41]. Решение линейных уравнений (96) также может быть выражено через функцию g (см., например, [8, 42])

$$\phi_{\pm} = \sqrt{g} \exp\left(\pm i \int^x \frac{\sqrt{P}}{g} dx\right). \quad (102)$$

Теперь мы можем обратиться к обсуждению квазиклассического предела.

Рассмотрим трансформацию крупномасштабного импульса в последовательность солитонов. Согласно изложенной во Введении картине, эта трансформация происходит через промежуточную стадию формирования и эволюции ДУВ, которые в теории Гуревича-Питаевского [10] (см. также [14] и имеющиеся там ссылки) могут быть представлены в виде периодических решений с медленно меняющимися параметрами, что ведет к медленному изменению как P , так и параметров, входящих в g . Тем не менее, следуя методу Уизема в формулировке Кричевера [43] (см. также [44]) мы предполагаем, что выражения (101) и (102) остаются верными во все время эволюции ρ и u от начальных гладких распределений до асимптотических последовательностей солитонов. Пока распределения ρ и u являются гладкими функциями, функция g также гладкая и поэтому ее производными в (100) можно пренебречь, так что мы получаем

$$\frac{\sqrt{P}}{g} \approx \sqrt{-\bar{\mathcal{A}}} \equiv \bar{k}(\rho, u, \lambda), \quad (103)$$

где $\bar{\mathcal{A}} = \bar{\mathcal{A}}(\rho, u)$ получается из $\mathcal{A}$ в том же приближении с опущенными производными функций ρ и u . В результате мы приходим к квазиклассическому пределу формулы (102):

$$\phi_{\pm} \approx \sqrt{g} \exp\left(\pm i \int^x \bar{k}(\rho, u, \lambda) dx\right). \quad (104)$$

Условие, что $\phi_{\pm}$ должны быть однозначными функциями x , дает правило квантования Бора-Зоммерфельда (см., например, [6–8])

$$\int_{x_1(\lambda_n)}^{x_2(\lambda_n)} \bar{k}(\rho_0(x), u_0(x), \lambda_n) dx = \pi \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (105)$$

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

где $x_1(\lambda_n), x_2(\lambda_n)$ — точки поворота. Сравнение с формулой (48) дает выражение для волнового числа, фигурирующего в нашей теории:

$$k(\rho, u) = 2\bar{k}(\rho, u) = 2\sqrt{-\bar{\mathcal{A}}(\rho, u)}, \quad (106)$$

а также ведет к некому выражению, связывающему постоянную интегрирования q нашей теории и спектральный параметр λ схемы АКНС. Следовательно, в случае нелинейных уравнений, полностью интегрируемых в схеме АКНС, мы получаем выражение для функции $k = k(\rho, u)$ без необходимости решать уравнения (41).

Подстановка $\sqrt{P}/g = k/2$ в (101) дает уравнение

$$k_t - (k\bar{\mathcal{B}})_x = 0, \quad (107)$$

где $\bar{\mathcal{B}}(\rho, u)$ снова получается из $\mathcal{B}$ в таком же квазиклассическом приближении. Это уравнение должно совпасть с законом сохранения числа волн (2), так что мы получаем

$$\frac{\omega}{k} = -\bar{\mathcal{B}}. \quad (108)$$

Таким образом, в квазиклассическом приближении функции $\mathcal{A}$ и $\mathcal{B}$ схемы АКНС оказываются связанными с законом дисперсии $\omega = \omega(k, \rho, u)$ линейных волн и с функцией $k = k(\rho, u, q)$, получаемой решением уравнений (41), если эти производные коммутируют. С этой точки зрения условие коммутативности производных (41) может рассматриваться как «тест на интегрируемость» нелинейных уравнений в рамках схемы АКНС. Если это условие выполняется, то выражения

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{A}}(\rho, u, q) &= -\frac{1}{4}k^2(\rho, u, q), \\ \bar{\mathcal{B}}(\rho, u, q) &= -\frac{\omega(k(\rho, u, q), \rho, u)}{k(\rho, u, q)} \end{aligned} \quad (109)$$

представляют квазиклассический предел функций $\mathcal{A}, \mathcal{B}$ в паре Лакса (96), а q играет роль спектрального параметра.

Конкретизируем эти формулы на примере НУШ (60) с $f(\rho) = \rho$. В этом случае имеем (см. [45])

$$\begin{aligned} \mathcal{A} &= -\left(\lambda + \frac{i\psi_x}{2\psi}\right)^2 + \psi^*\psi - \left(\frac{\psi_x}{2\psi}\right)_x, \\ \mathcal{B} &= -\lambda + \frac{i}{2}\frac{\psi_x}{\psi}. \end{aligned} \quad (110)$$

Подстановка (61) и пренебрежение производными функций ρ и u дает

$$\bar{\mathcal{A}} = -\left(\lambda - \frac{u}{2}\right)^2 + \rho, \quad \bar{\mathcal{B}} = -\lambda - \frac{u}{2}. \quad (111)$$

Тогда из формулы (106) следует выражение

$$k^2 = 4\left[(\lambda - u/2)^2 - \rho\right],$$

совпадающее с (69) для $q = 2\lambda$. Исключение λ из этого уравнения и из формулы (108), т.е. из $\omega = k(\lambda + u/2)$, воспроизводит закон дисперсии (64).

Несмотря на формальное сходство между правилами Бора–Зоммерфельда для интегрируемых и неинтегрируемых уравнений, следует, однако, подчеркнуть одно важное физическое различие между этими двумя ситуациями. Как видно, например, из рис. 1, даже при очень большом времени эволюции малоамплитудная часть волновой структуры еще не превратилась в солитоны, характеризующиеся четко определенными скоростями и амплитудами. Тем не менее в интегрируемом случае можно с полной определенностью утверждать, что если время эволюции будет достаточно большим, то в конечном счете образуется ровно N солитонов, отвечающих дискретному спектру ассоциированной с уравнением линейной задачи. В неинтегрируемом случае такой теоремы нет, а взаимодействие между солитонами является неупругим. Поэтому, несмотря на увеличение расстояния между солитонами в постоянно расширяющихся дисперсионных ударных волнах, нельзя исключить существенного влияния взаимодействия на конечные состояния солитонов с малой амплитудой и очень близкими скоростями. В принципе такое взаимодействие может даже приводить к слиянию солитонов, и, как было показано в работах [46, 47], такого рода процессы играют важную роль в солитонной турбулентности, описываемой неинтегрируемыми уравнениями с фокусирующей нелинейностью. Естественно, эти эффекты выходят за рамки нашей теории и предлагаемое правило Бора–Зоммерфельда применимо лишь для вычисления параметров достаточно быстро сформировавшихся солитонов, когда влиянием взаимодействия между солитонами на их скорости в конечном состоянии можно пренебречь. Это означает, что для таких солитонов через время эволюции $t \sim l/c_0$ расстояние между солитонами $\sim L$ должно быть много больше, чем их ширина $\sim \tilde{k}^{-1}$ (здесь l — начальная ширина импульса, c_0 — характерная скорость линейных волн, распространяющихся по начальному профилю).

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Развитый в этой работе асимптотический метод предлагает простой способ вычисления параметров солитонов, образующихся из исходно гладкого нелинейных уравнений. Применительно к интегрируемым уравнениям он предоставляет простой способ вывода правила квантования Бора–Зоммерфельда для линейной спектральной задачи, ассоциированной с нелинейным уравнением в схеме АКНС. Условие коммутативности производных, определенных формулами (41) или их обобщениями (см. [35]) может использоваться как «тест на интегрируемость»: если они коммутируют, то представляется весьма правдоподобным, что рассматриваемое уравнение полностью интегрируемо в схеме АКНС и формулы (109) предоставляют полезную информацию о квазиклассическом пределе функций, определяющих соответствующую пару Лакса. Наконец, результаты статьи могут быть использованы также при рассмотрении задач, связанных с распространением высокочастотных волновых пакетов по неоднородному и меняющемуся со временем фону, как это было продемонстрировано в работе [35].

Благодарности. Автор благодарит Л. Ф. Каланса де Брито и Д. В. Шайкина за полезные обсуждения.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда N 19-72-30028 (разделы II-III) и в рамках проекта Госзадания FFUU-2021-0003 (разделы IV-V).

ЛИТЕРАТУРА

1. В. Е. Захаров, С. В. Манаков, С. П. Новиков, Л. П. Питаевский, *Теория солитонов: Метод обратной задачи*, Наука, Москва (1980).
2. М. Абловиц, Х. Сигур, *Солитоны и метод обратной задачи*, Мир, Москва (1987).
3. А. Ньюэлл, *Солитоны в математике и физике*, Мир, Москва (1989).
4. S. C. Gardner, J. M. Greene, M. D. Kruskal, and R. M. Miura, Phys. Rev. Lett. **19**, 1095 (1967).
5. V. I. Karpman, Phys. Lett. A **25**, 708 (1967).
6. В. И. Карпман, *Нелинейные волны в диспергирующих средах*, Наука, Москва (1973).
7. S. Jin, C. D. Levermore, and D. W. McLaughlin, Comm. Pure Appl. Math. **52**, 613 (1999).
8. A. M. Kamchatnov, R. A. Kraenkel, and B. A. Umarov, Phys. Rev. E **66**, 036609 (2002).
9. В. Е. Захаров, А. Б. Шабат, ЖЭТФ **64**, 1627 (1973).
10. А. В. Гуревич, Л. П. Питаевский, ЖЭТФ **65**, 590 (1973).
11. G. B. Whitham, Proc. Roy. Soc. London A **283**, 238 (1965).
12. Дж. Уизем, *Линейные и нелинейные волны*, Мир, Москва (1977).
13. А. В. Гуревич, Л. П. Питаевский, ЖЭТФ **93**, 871 (1987).
14. А. М. Камчатнов, УФН **191**, 52 (2021).
15. К. Ланцош, *Вариационные принципы механики*, Мир, Москва (1965).
16. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Гидродинамика*, Физматлит, Москва (2006).
17. G. A. El, Chaos **15**, 037103 (2005).
18. A. M. Kamchatnov, Chaos **30**, 123148 (2020).
19. A. M. Kamchatnov and D. V. Shaykin, Phys. Fluids **33**, 052120 (2021).
20. A. M. Kamchatnov, Phys. Rev. E **99**, 012203 (2019).
21. А. М. Камчатнов, ЖЭТФ **159**, 76 (2021).
22. L. F. Calazans de Brito, and A. M. Kamchatnov, Phys. Rev. E **104**, 054203 (2021).
23. G. A. El, A. Gammal, E. G. Khamis, R. A. Kraenkel, and A. M. Kamchatnov, Phys. Rev. A **76**, 053813 (2007).
24. G. A. El, R. H. J. Grimshaw, and N. F. Smyth, Physica D **237**, 2423 (2008).
25. M. D. Maiden, N. A. Franco, E. G. Webb, G. A. El, and M. A. Hoefer, J. Fluid Mech. **883**, A10 (2020).
26. H. Poincaré, *Les Méthodes Nouvelles de la Mécanique Céleste*, t. III, (Paris, Gauthier-Villar, 1899) [перевод: А. Пуанкаре, Избранные труды, т. II, Наука, Москва (1972)].
27. Э. Картан, *Интегральные инварианты*, ГИТТЛ, Москва–Ленинград (1940).

28. Г. Ламб, *Гидродинамика*, ОГИЗ-ГИТТЛ, Москва–Ленинград (1947).
29. G. G. Stokes, *Mathematical and Physical Papers*, Cambridge University Press, Cambridge (1905), Vol. V, p. 163.
30. O. Akimoto and K. Ikeda, J. Phys. A: Math. Gen. **10**, 425 (1977).
31. S. A. Darmanyan, A. M. Kamchatnov, and M. Nevière, ЖЭТФ **123**, 997 (2003).
32. Ф. Р. Гантмахер, *Лекции по аналитической механике*, Наука, Москва (1966).
33. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Физматлит, Москва (2001).
34. В. И. Арнольд, *Математические методы классической механики*, Наука, Москва (1989).
35. D. V. Shaykin, and A. M. Kamchatnov, Phys. Fluids **35**, 062108 (2023), preprint arXiv:2303.16592 (2023).
36. M. A. Hoefer, J. Nonlinear Sci. **24**, 525 (2014).
37. A. M. Kamchatnov and M. Salerno, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **42**, 185303 (2009).
38. M. J. Ablowitz, D. J. Kaup, A. C. Newell, and H. Segur, Stud. Appl. Math. **53**, 249 (1974).
39. A. M. Kamchatnov and R. A. Kraenkel, J. Phys. A: Math. Gen. **35**, L13 (2002).
40. A. M. Kamchatnov, Phys. Lett. A **186**, 387 (1994).
41. A. M. Kamchatnov, Physica D **188**, 247 (2004).
42. A. M. Kamchatnov, J. Phys. A: Math. Gen. **34**, L441 (2001).
43. И. М. Кричевер, Функ. Анализ Прилож. **22**, 37 (1988).
44. B. A. Dubrovin and S. P. Novikov, Sov. Sci. Rev. C. Math. Phys. **9**, 1 (1993).
45. S. J. Alber, Complex Deformations of Integrable Hamiltonians Over Generalized Jacobi Varieties, in *Nonlinear Processes in Physics*, ed. by A. S. Fokas, D. J. Kaup, A. C. Newell, and V. E. Zakharov, p.6 Springer, Berlin (1993).
46. С. Ф. Крылов, В. В. Яньков, ЖЭТФ **79**, 82 (1980).
47. А. И. Дьяченко, В. Е. Захаров, А. Н. Пушкарёв, В. Ф. Швец, В. В. Яньков, ЖЭТФ **96**, 2026 (1989).

ОПТИЧЕСКИЙ АНАЛОГ ВРАЩАЮЩЕГОСЯ БИНАРНОГО БОЗЕ-КОНДЕНСАТА

*В. П. Рубан**

*Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 26 мая 2023 г.,
после переработки 26 мая 2023 г.
Принята к публикации 31 мая 2023 г.

Связанные нелинейные уравнения Шредингера для параксиальной оптики с двумя круговыми поляризациями света в дефокусирующей керровской среде с аномальной дисперсией по форме совпадают с уравнениями Гросса–Питаевского для бинарного бозе-конденсата холодных атомов в режиме разделения фаз. При этом винтовая симметрия оптического волновода соответствует вращению поперечного потенциала, удерживающего бозе-конденсат. Значительное влияние на распространение световой волны в такой системе оказывает «центробежная сила». Численные эксперименты для волновода эллиптического сечения выявили ранее не наблюдавшиеся в оптике характерные структуры, состоящие из квантованных вихрей и доменных стенок между двумя поляризациями.

DOI: 10.31857/S0044451023110160

EDN: PKISHU

1. ВВЕДЕНИЕ

Как известно, распространение квазимонохроматической световой волны в оптической среде с керровской нелинейностью приближенно описывается нелинейным уравнением Шредингера (НУШ), см., например, [1–4] и ссылки там. При этом волна в дефокусирующей среде с аномальной дисперсией групповой скорости подобна разреженному бозе-конденсату холодных отталкивающихся атомов, для которого характерны мягкие топологические возбуждения в виде квантованных вихрей [5]. Оптическая волна может нести в себе две круговые поляризации, и тогда свет описывается двумя связанными НУШ [6], аналогично бинарному бозе-конденсату [7–13]. В бинарной системе, помимо темных солитонов и квантованных вихрей в каждой из двух компонент, возможны еще доменные стенки, разделяющие области с правой и левой круговыми поляризациями [14–22]. Доменная стенка обладает эффективным поверхностным натяжением [10, 23], которое

оказывает сильное воздействие на динамику областей. В теории бозе-конденсатов разделение фаз и сопутствующие ему явления исследованы весьма подробно (см., например, [24–48] и ссылки там). Что касается нелинейной оптики, существенно трехмерные бинарные световые структуры были обнаружены в недавних работах [21, 22].

В настоящей работе внимание уделено пока еще малоизученному вопросу о нелинейном квазимонохроматическом световом пучке с двумя поляризациями в широком волноводе с винтовой симметрией, где пространственная неоднородность показателя преломления среды $n = n_0 + \tilde{n}(x, y, \zeta)$ на несущей частоте ω_0 зависит от двух комбинаций безразмерных переменных:

$$\begin{aligned}\tilde{x} &= x \cos \Omega \zeta + y \sin \Omega \zeta, \\ \tilde{y} &= y \cos \Omega \zeta - x \sin \Omega \zeta.\end{aligned}$$

В зависимости от рассматриваемой системы параметр Ω определяет или шаг винтового волновода, или период вращения атомной ловушки. Малое отклонение имеет вид

$$\tilde{n} \propto -U(\tilde{x}, \tilde{y}),$$

где U — некоторая двумерная яма. Заметим сразу же, что эволюционной переменной вместо времени t у нас служит дистанция ζ вдоль оси волновода, а

* E-mail: ruban@itp.ac.ru

роль третьей «пространственной» координаты играет «запаздывающее» время

$$\tau = t - \zeta/v_{gr}.$$

При сравнении с бозе-конденсатами следует вместо ζ иметь в виду t , а вместо τ подразумевать z . Указанный тип волноводов интересен тем, что в физике холодных газов ему соответствует класс равномерно вращающихся внешних потенциалов

$$V(x, y, t) = U(x \cos \Omega t + y \sin \Omega t, y \cos \Omega t - x \sin \Omega t). \quad (1)$$

С практической точки зрения такие бесконечные по координате z потенциальные ямы для атомов едва ли реалистичны. Но для оптики они означают всего лишь возможную бесконечную протяженность светового пучка по переменной τ , что является вполне приемлемым приближением. Как известно, вращение бозе-конденсата приводит к появлению в нем квантованных вихрей с различными конфигурациями. Наличие двух компонент дополнительно обогащает картину доменными стенками [34–37]. Соответственно, и в оптике должны иметь место аналогичные режимы. Цель этой работы — пронаблюдать в численных экспериментах ранее неизвестные когерентные бинарные структуры, актуальные для оптических систем.

2. УРАВНЕНИЯ И ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД

Мы рассматриваем трехмерную, оптически прозрачную диэлектрическую среду с дефокусирующей керровской нелинейностью. Среда слабонеоднородна по пространству. Фоновая диэлектрическая проницаемость дается функцией частоты $\varepsilon(\omega)$, так что соответствующий закон дисперсии имеет вид

$$k(\omega) = \sqrt{\varepsilon(\omega)}\omega/c.$$

Нас интересует область аномальной дисперсии групповой скорости (где $k''(\omega) < 0$). Как правило, такой диапазон находится вблизи низкочастотного края окна прозрачности (в реальных веществах это часто инфракрасная область спектра; см., например, работы [49, 50]).

Уравнения для медленных комплексных амплитуд $A_{1,2}(x, y, \tau, \zeta)$ левой и правой круговых поляризаций световой волны хорошо известны [6, 14–21]. Поэтому мы здесь только кратко напомним основ-

ную идею их вывода. Отправной точкой является следствие уравнений Максвелла

$$\text{rot rot } \mathbf{E} = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2}. \quad (2)$$

Вводятся медленные комплексные огибающие $\mathbf{E}$ и $\mathbf{D}$ заменами

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= \text{Re}[\mathbf{E} \exp(ik_0\zeta - i\omega_0 t)], \\ \mathbf{D} &= \text{Re}[\mathbf{D} \exp(ik_0\zeta - i\omega_0 t)], \end{aligned}$$

где $k_0 = k(\omega_0)$ — несущее волновое число. Далее нужно подставить в (2) слабонелинейную материальную зависимость

$$\begin{aligned} \mathbf{D} \approx \int \varepsilon(\omega_0 + \tilde{\omega}) \mathbf{E}_{\tilde{\omega}} e^{-i\tilde{\omega}t} \frac{d\tilde{\omega}}{2\pi} + \\ + \tilde{\varepsilon}(x, y, \zeta) \mathbf{E} + \alpha(\omega_0) |\mathbf{E}|^2 \mathbf{E} + \beta(\omega_0) (\mathbf{E} \cdot \mathbf{E}) \mathbf{E}^* \end{aligned} \quad (3)$$

с отрицательными функциями α и β в дефокусирующем случае. В ходе преобразований возникает уравнение вида

$$\hat{L} \mathbf{E} = s \{\mathbf{E}\}$$

с линейным оператором

$$\hat{L} = (k_0 - i\partial_\zeta)^2 - [k(\omega_0 + i\partial_t)]^2$$

и малой правой частью, которая включает в себя поперечный лапласиан, нелинейность и пространственную неоднородность. В главном порядке по малости s можно положить

$$\hat{L} \approx 2k_0(-i\partial_\zeta - ik'_0\partial_t + k''_0\partial_t^2/2). \quad (4)$$

В конце вывода для перехода к скалярным функциям $A_{1,2}$ делается замена

$$\mathbf{E} \approx [(\mathbf{e}_x + i\mathbf{e}_y)A_1 + (\mathbf{e}_x - i\mathbf{e}_y)A_2]/\sqrt{2}. \quad (5)$$

В качестве масштаба для поперечных координат удобно взять некоторый большой параметр R_0 (порядка нескольких десятков длин волн, т.е. до одной сотни микрометров). Продольную координату ζ будем измерять в единицах $k_0 R_0^2$ (несколько сантиметров), переменную τ — в единицах $R_0 \sqrt{k_0 |k''_0|}$, а электрическое поле — в единицах $\sqrt{2\varepsilon(\omega_0)/|\alpha(\omega_0)|/(k_0 R_0)}$. Удерживающий потенциал тогда определяется как

$$V = -k_0^2 R_0^2 \tilde{\varepsilon}/2\varepsilon(\omega_0).$$

В этих безразмерных переменных связанные нелинейные уравнения Шредингера имеют вид

$$i\frac{\partial A_{1,2}}{\partial \zeta} = \left[-\frac{1}{2}\Delta + V(x, y, \zeta) + |A_{1,2}|^2 + g_{12}|A_{2,1}|^2 \right] A_{1,2}, \quad (6)$$

где

$$\Delta = \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_\tau^2$$

— трехмерный оператор Лапласа в «координатном» пространстве (x, y, τ) . Параметр перекрестной фазовой модуляции

$$g_{12} = 1 + 2\beta(\omega_0)/\alpha(\omega_0)$$

в типичном случае примерно равен 2, что соответствует режиму разделения фаз.

В отличие от недавней работы [21], где рассматривались «невращающиеся» параболические потенциалы $(x^2 + \kappa^2 y^2)/2$, здесь мы сосредоточимся на винтовых волноводах с плоским дном и резкими стенками. Такие волноводы легче реализовать экспериментально. Но для численного моделирования более удобны гладкие потенциалы; поэтому мы будем аппроксимировать соответствующую прямоугольную яму выражением

$$U = C[1 - \exp(-[(\tilde{x}^2 + \kappa^2 \tilde{y}^2)/36]^5)] \quad (7)$$

с большим параметром $C \sim 50$ и анизотропией $\kappa > 1$ (во всех вычислениях бралось значение $\kappa^2 = 1.5$). В результате указанного выбора эффективный диаметр волновода равен примерно 10 (до одного миллиметра). На таком масштабе укладывается несколько сотен длин волн света. При «частоте вращения» $\Omega \sim 1$ на площади поперечного сечения помещается порядка десятка квантованных вихрей, а ширина их сердцевин зависит от интенсивности волны как $\xi \sim 1/\sqrt{I}$. Такого же порядка и ширина доменной стенки w . Как мы увидим далее из численных результатов, наиболее интересны значения $I \lesssim 10$.

Важно, что уравнения (6) представляют собой гамильтонову систему

$$i\partial A_{1,2}/\partial \zeta = \delta \mathcal{H}/\delta A_{1,2}^*$$

Соответствующий неавтономный гамильтониан есть

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \frac{1}{2} \int (|\nabla A_1|^2 + |\nabla A_2|^2) dx dy d\tau + \\ & + \int V(x, y, \zeta) (|A_1|^2 + |A_2|^2) dx dy d\tau + \\ & + \frac{1}{2} \int (|A_1|^4 + |A_2|^4 + 2g_{12}|A_1|^2|A_2|^2) dx dy d\tau. \end{aligned} \quad (8)$$

Этот функционал не сохраняется в процессе эволюции. Однако, поскольку во вращающейся системе

координат мы имеем автономную систему, интегралом движения является функционал

$$\mathcal{H}_\Omega = \mathcal{H} - \Omega \int [A^\dagger (iy\partial_x - ix\partial_y) A] dx dy d\tau, \quad (9)$$

где $A = (A_1, A_2)^T$ — двухкомпонентный столбец. Кроме того, сохраняются также интегралы интенсивностей

$$N_{1,2} = \int |A_{1,2}|^2 dx dy d\tau.$$

Для численного моделирования уравнений (6) использовался стандартный метод (split-step Fourier method) второго порядка точности по эволюционной переменной ζ в исходной (невращающейся) системе координат. Вычислительная область по переменным x, y, τ имела форму куба со стороной 6π , с периодическими граничными условиями. Но, поскольку потенциальная яма достаточно глубока, функции $A_{1,2}$ быстро убывают практически до нуля в поперечных направлениях, так что влияние поперечных границ пренебрежимо мало.

Точность вычислений контролировалась сохранением интегралов движения до 3–6 десятичных знаков на интервале $0 < \zeta < 500$ (что практически составляет длину распространения в несколько десятков метров).

Для численного приготовления начального состояния с как можно менее возбужденными жесткими степенями свободы применялся метод распространения в мнимом времени (imaginary-time propagation), причем в равномерно вращающейся системе координат. Этот метод соответствует чисто градиентной диссипативной динамике

$$-\partial A_{1,2}/\partial \eta = \delta \tilde{\mathcal{H}}/\delta A_{1,2}^*,$$

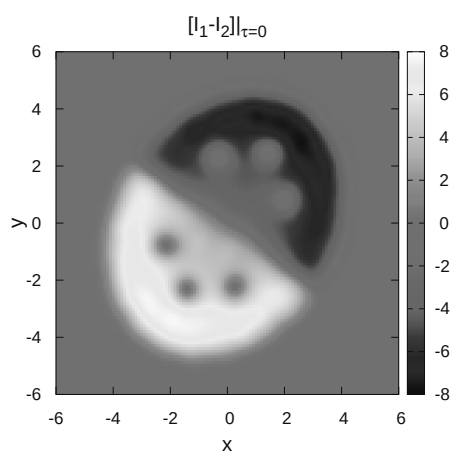
где модифицированный гамильтониан

$$\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{H}_\Omega - \mu(N_1 + N_2)$$

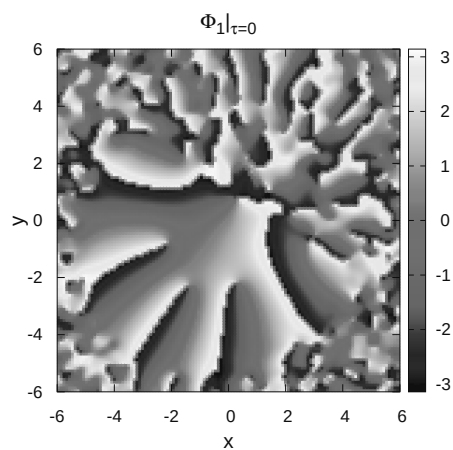
не содержит явной зависимости от квазивременной переменной η . Параметр μ (химический потенциал) определяет характерные значения интенсивностей

$$I_{1,2} = |A_{1,2}|^2 \sim \mu.$$

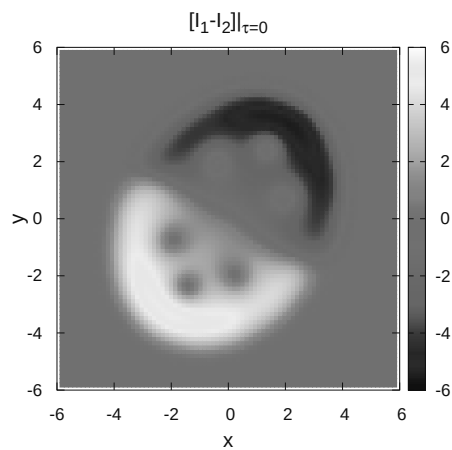
Интервал переменной η составлял несколько десятков, так что в результате все жесткие степени свободы были эффективно погашены и система оказывалась в медленном динамическом режиме недалеко от минимума $\tilde{\mathcal{H}}$.



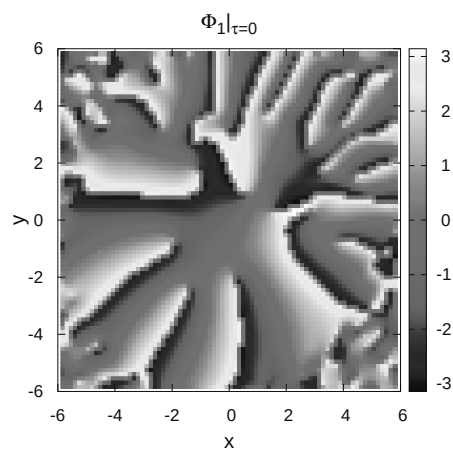
a



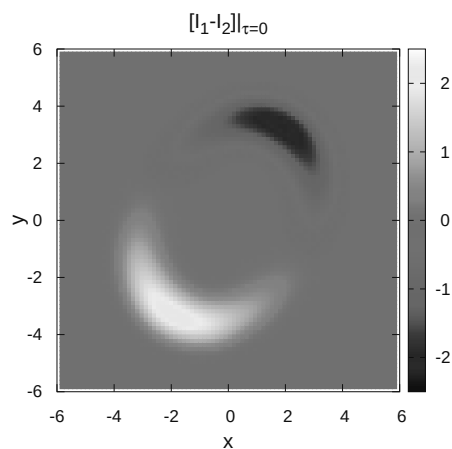
a



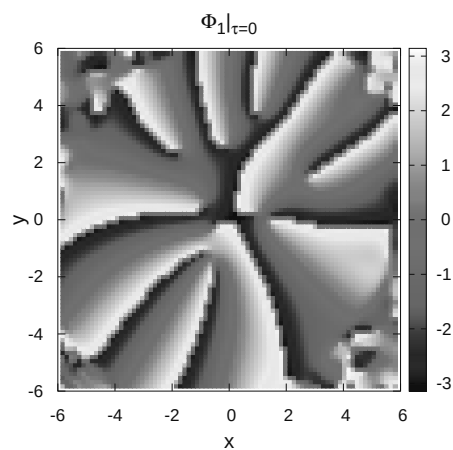
b



b



c



c

Рис. 1. Квазидвумерные конфигурации при $\zeta = 500$, соответствующие частоте вращения $\Omega = 0.8$. Показана разность локальных интенсивностей в поперечном сечении $\tau = 0$ для трех значений химического потенциала: $\mu = 4$ (a); $\mu = 2$ (b); $\mu = -1$ (c)

Рис. 2. Фаза Φ_1 комплексной огибающей A_1 для трех конфигураций, показанных на рис. 1. Здесь панели a, b, c соответствуют таковым на рис. 1

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

Были проведены две серии численных экспериментов. В первой серии исследовались квазидвумерные конфигурации, когда зависимость от переменной τ была слабой, так что вихревые нити шли более-менее параллельно доменной стенке. Во второй серии экспериментов вихри по-прежнему были ориентированы вдоль пучка, но при $\zeta = 0$ две доменные стенки (на одном периоде по τ) разрезали пучок поперек, образуя тем самым чередующиеся вдоль его оси области правой и левой поляризации, так что вихри присоединялись своими концами к доменным стенкам и сильно деформировали их.

Характерные примеры из первой серии представлены на рис. 1 и 2. Поскольку динамика на всем интервале ζ оставалась квазидвумерной, достаточно показать типичное распределение полей в одном из поперечных сечений. Так как интенсивности I_1 и I_2 совместно отличны от нуля только лишь на толщине доменной стенки, их разность оказывается достаточно информативной величиной. Практически, если она положительна, то мы оказываемся в лево-поляризованной области, а если отрицательна, то — в право-поляризованной. При взгляде на рис. 1 бросается в глаза, что интенсивности максимальны не в центре волновода, а на периферии. Это свойство — прямое следствие действия «центробежной силы» во вращающейся системе координат. Центробежная сила прижимает «световые жидкости» к стенкам волновода. Особенно интересен в этом отношении рис. 1с, соответствующий отрицательному значению химического потенциала. Мы видим здесь, что в середине волновода имеется обширная область, где обе интенсивности практически равны нулю. Это есть не что иное, как нелинейный вариант эффекта шепчущей галереи. Интересную информацию о положении вихрей дает рис. 2, где показаны соответствующие рис. 1 распределения фазы первой компоненты. Видно, что лишь часть вихрей расположена в области с заметной интенсивностью I_1 (явные вихри). Эти явные вихри избегают максимумов интенсивности и потому группируются ближе к центру. Другая часть (скрытые вихри) находится в области, где I_1 ничтожно мала. На рис. 1с вообще нет явных вихрей, но имеется десяток скрытых вихрей именно в «пустой» центральной области волновода, как это следует из рис. 2с.

Что касается второй серии экспериментов, то существенно трехмерная эволюция поперечных доменных стенок с присоединенными вихрями проходила различно для различных значений μ . При ма-

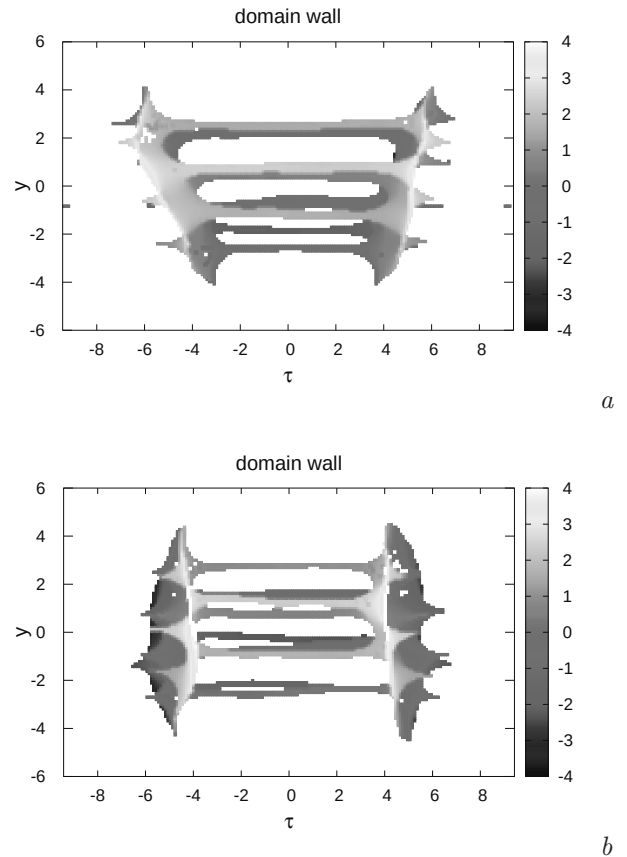


Рис. 3. Численные примеры долгоживущих поперечных доменных стенок с присоединенными вихрями при $\zeta = 500$, $\Omega = 0.8$ для $\mu = 4$ (a) и $\mu = 8$ (b). Цветом отмечена x -координата тех точек числовой решетки, на которых $0 < (I_1 - I_2) < d$, причем $d = 1.0$ в случае (a) и $d = 1.8$ в случае (b). Поэтому оказались визуализированными сердцевинки вихрей в первой компоненте, а также тонкий слой вблизи серединной поверхности каждой доменной стенки

лых значениях $\mu = 0$ и $\mu = 1$ такие конфигурации быстро «разбалтывались», а затем, после некоторого переходного процесса, формировались квазидвумерные состояния, подобные описанным выше. При больших значениях $\mu = 4$ и $\mu = 8$ поперечные стенки, хотя и приобретали в среднем наклонную ориентацию, зависящую от ζ , продолжали свое существование на всем интервале ζ вплоть до самого конца вычислений. Понимания подобной смены режимов поведения пока нет. Два примера трехмерных структур показаны на рис. 3 (ср. с [37]).

Надо сказать, что при меньшей частоте вращения количество вихрей уменьшается, а стремление к поперечной ориентации доменных стенок усиливается. Эта тенденция вступает в конфликт

с упоминавшейся квазидвумерностью течений при небольших μ . Как следствие, в определенной области параметров (Ω, μ) оказывается возможен нетривиальный промежуточный режим, когда имеются один-два вихря и нестационарная, трехмерно-возмущенная доменная стенка, причем вихри способны иногда «прятаться» в эту стенку, полностью или частично. Такая динамика наблюдалась, например, при $\Omega = 0.4$, $\mu = 2$. Следует провести подробное исследование этого режима.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в этой работе проведена теоретическая аналогия между когерентной оптической волной в широком винтовом волноводе и вращающимся бинарным бозе-конденсатом холодных атомов. Некоторое различие между этими двумя системами состоит в виде поперечного удерживающего потенциала. Для атомов проще реализовать квадратичный потенциал, а для оптического волновода — плоский профиль показателя преломления с резкими краями. Соответственно, влияние центробежной силы более заметно в последнем случае. Указанное различие приводит к несколько различающимся квазистационарным картинам, как это видно из сравнения представленных здесь рисунков с рисунками в работах [34–37].

Нет сомнения, что данное направление исследований имеет широкие перспективы. Хотя пока что сделаны лишь первые шаги, но уже получены нетривиальные результаты и намечены очередные цели. В первую очередь, необходимо более систематически пройти по параметрической области (N_1, N_2, Ω) . Кроме того, с практической точки зрения важно изучить переходные динамические процессы, поскольку сформировать квазистационарные состояния сразу на входе в волновод будет затруднительно. Помимо винтовых волноводов, интересные эффекты должны иметь место и при некоторых других зависимостях формы поперечного сечения от координаты ζ . Так, периодические колебания площади сечения или других его геометрических параметров могут послужить причиной параметрических резонансов, которые в нелинейных системах обычно приводят к образованию определенных когерентных структур (см. в качестве примеров работы [32, 33]).

Вопрос о том, адекватна ли простейшая модель (6) для планирования и осуществления оптических экспериментов, нуждается в дальнейшем серьезном

рассмотрении. В реальных веществах могут оказать влияние неучтенные здесь факторы, например, дисперсия третьего порядка и т. п. Было бы в принципе интересно выйти за рамки квазимонохроматического режима и посмотреть, как при этом изменится волновая картина.

Финансирование. Работа выполнена в рамках Госзадания 0029-2021-0003.

ЛИТЕРАТУРА

1. Y. Kivshar and G. P. Agrawal, *Optical Solitons: From Fibers to Photonic Crystals*, 1st ed., Academic Press, California, USA (2003).
2. V. E. Zakharov and S. Wabnitz, *Optical Solitons: Theoretical Challenges and Industrial Perspectives*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (1999).
3. B. A. Malomed, *Multidimensional Solitons*, AIP Publishing (online), Melville, N. Y. (2022), <https://doi.org/10.1063/9780735425118>
4. F. Baronio, S. Wabnitz, and Yu. Kodama, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 173901 (2016).
5. P. G. Kevrekidis, D. J. Frantzeskakis, and R. Carretero-González, *The Defocusing Nonlinear Schrödinger Equation: From Dark Solitons to Vortices and Vortex Rings*, SIAM, Philadelphia (2015).
6. А. Л. Берхоер, В. Е. Захаров, *ЖЭТФ* **58**, 903 (1970).
7. Tin-Lun Ho and V. B. Shenoy, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3276 (1996).
8. H. Pu and N. P. Bigelow, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1130 (1998).
9. B. P. Anderson, P. C. Haljan, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 2857 (2000).
10. S. Coen and M. Haelterman, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 140401 (2001).
11. G. Modugno, M. Modugno, F. Riboli, G. Roati, and M. Inguscio, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 190404 (2002).
12. E. Timmermans, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5718 (1998).
13. P. Ao and S. T. Chui, *Phys. Rev. A* **58**, 4836 (1998).

14. M. Haelterman and A. P. Sheppard, Phys. Rev. E **49**, 3389 (1994).
15. M. Haelterman and A. P. Sheppard, Phys. Rev. E **49**, 4512 (1994).
16. A. P. Sheppard and M. Haelterman, Opt. Lett. **19**, 859 (1994).
17. Yu. S. Kivshar and B. Luther-Davies, Phys. Rep. **298**, 81 (1998).
18. N. Dror, B. A. Malomed, and J. Zeng, Phys. Rev. E **84**, 046602 (2011).
19. A. H. Carlsson, J. N. Malmberg, D. Anderson, M. Lisak, E. A. Ostrovskaya, T. J. Alexander, and Yu. S. Kivshar, Opt. Lett. **25**, 660 (2000).
20. A. S. Desyatnikov, L. Torner, and Yu. S. Kivshar, Progr. Opt. **47**, 291 (2005).
21. В. П. Рубан, Письма в ЖЭТФ **117**, 292 (2023).
22. В. П. Рубан, Письма в ЖЭТФ **117**, 590 (2023).
23. B. Van Schaeybroeck, Phys. Rev. A **78**, 023624 (2008).
24. K. Sasaki, N. Suzuki, and H. Saito, Phys. Rev. A **83**, 033602 (2011).
25. H. Takeuchi, N. Suzuki, K. Kasamatsu, H. Saito, and M. Tsubota, Phys. Rev. B **81**, 094517 (2010).
26. N. Suzuki, H. Takeuchi, K. Kasamatsu, M. Tsubota, and H. Saito, Phys. Rev. A **82**, 063604 (2010).
27. H. Kokubo, K. Kasamatsu, and H. Takeuchi, Phys. Rev. A **104**, 023312 (2021).
28. K. Sasaki, N. Suzuki, D. Akamatsu, and H. Saito, Phys. Rev. A **80**, 063611 (2009).
29. S. Gautam and D. Angom, Phys. Rev. A **81**, 053616 (2010).
30. T. Kadokura, T. Aioi, K. Sasaki, T. Kishimoto, and H. Saito, Phys. Rev. A **85**, 013602 (2012).
31. K. Sasaki, N. Suzuki, and H. Saito, Phys. Rev. A **83**, 053606 (2011).
32. D. Kobayakov, V. Bychkov, E. Lundh, A. Bezett, and M. Marklund, Phys. Rev. A **86**, 023614 (2012).
33. D. K. Maity, K. Mukherjee, S. I. Mistakidis, S. Das, P. G. Kevrekidis, S. Majumder, and P. Schmelcher, Phys. Rev. A **102**, 033320 (2020).
34. K. Kasamatsu, M. Tsubota, and M. Ueda, Phys. Rev. Lett. **91**, 150406 (2003).
35. K. Kasamatsu and M. Tsubota, Phys. Rev. A **79**, 023606 (2009).
36. P. Mason and A. Aftalion, Phys. Rev. A **84**, 033611 (2011).
37. K. Kasamatsu, H. Takeuchi, M. Tsubota, and M. Nitta, Phys. Rev. A **88**, 013620 (2013).
38. В. П. Рубан, Письма в ЖЭТФ **113**, 848 (2021).
39. В. П. Рубан, ЖЭТФ **160**, 912 (2021).
40. K. J. H. Law, P. G. Kevrekidis, and L. S. Tuckerman, Phys. Rev. Lett. **105**, 160405 (2010); *Erratum*, Phys. Rev. Lett. **106**, 199903 (2011).
41. M. Pola, J. Stockhofe, P. Schmelcher, and P. G. Kevrekidis, Phys. Rev. A **86**, 053601 (2012).
42. S. Hayashi, M. Tsubota, and H. Takeuchi, Phys. Rev. A **87**, 063628 (2013).
43. G. C. Katsimiga, P. G. Kevrekidis, B. Prinari, G. Biondini, and P. Schmelcher, Phys. Rev. A **97**, 043623 (2018).
44. A. Richaud, V. Penna, R. Mayol, and M. Guilleumas, Phys. Rev. A **101**, 013630 (2020).
45. A. Richaud, V. Penna, and A. L. Fetter, Phys. Rev. A **103**, 023311 (2021).
46. В. П. Рубан, Письма в ЖЭТФ **113**, 539 (2021).
47. В. П. Рубан, Письма в ЖЭТФ **115**, 450 (2022).
48. V. P. Ruban, W. Wang, C. Ticknor, and P. G. Kevrekidis, Phys. Rev. A **105**, 013319 (2022).
49. X. Liu, B. Zhou, H. Guo, and M. Bache, Opt. Lett. **40**, 3798 (2015).
50. X. Liu and M. Bache, Opt. Lett. **40**, 4257 (2015).

Главный редактор *А. И. СМЕРНОВ*

Редколлегия:

д-р физ.-мат. наук С. О. АЛЕКСЕЕВ, канд. физ.-мат. наук Ю. С. БАРАШ,
д-р физ.-мат. наук И. Г. ЗУБАРЕВ,
д-р физ.-мат. наук Е. И. КАЦ (зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ во Франции),
д-р физ.-мат. наук В. П. КРАЙНОВ, д-р физ.-мат. наук А. С. МЕЛЬНИКОВ
д-р физ.-мат. наук М. С. ПШИРКОВ акад. М. В. САДОВСКИЙ,
канд. физ.-мат. наук С. С. СОСИН, член-корр. РАН С. В. ТРОИЦКИЙ (зам. гл. редактора),
д-р физ.-мат. наук А. В. ФИЛИППОВ, член-корр. РАН И. А. ФОМИН (зам. гл. редактора),

Редакционный совет:

член-корр. РАН В. В. ЛЕБЕДЕВ, д-р физ.-мат. наук В. С. ПОПОВ

Зав. редакцией Н. Г. Церевитинова
Редакторы: Л. Б. Кульчицкая, Т. Г. Орехова, Т. Н. Смирнова