

Том 165, Выпуск 5

ISSN 0044-4510

Май 2024



ЖУРНАЛ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ *и* ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ



НАУКА

— 1727 —

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ОСНОВАН В МАРТЕ 1873 ГОДА

ВЫХОДИТ 12 РАЗ В ГОД

МОСКВА

ТОМ 165, ВЫПУСК 5

МАЙ 2024

РАН

ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ ПОД РУКОВОДСТВОМ ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК РАН

СОДЕРЖАНИЕ

АТОМЫ, МОЛЕКУЛЫ, ОПТИКА

- Эффекты интерференции различных каналов импульсного возбуждения резонансов когерентного пленения населенностей в ячейках с парами щелочного металла и буферным газом
.....**Волошин Г. В., Баранцев К. А., Литвинов А. Н.** 607
- Эволюция свойств операторов фазы электромагнитного поля в моделях Раби и Джейнса–Каммингса**Козловский А. В.** 618

ТВЕРДЫЕ ТЕЛА И ЖИДКОСТИ

- Когерентные состояния в тепловом квантовом транспорте**Орленко Е. В., Орленко Ф. Е.** 627
- Диффузия атомов водорода из диэлектрических подложек Si_3N_4 в аморфные и поликристаллические пленки Si и Ge**Арапкина Л. В., Чиж К. В., Ставровский Д. Б., Дубков В. П., Сторожевых М. С., Юрьев В. А.** 647
- Локальная структура и затвердевание стеклообразующего расплава $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_4\text{Gd}_2\text{Tb}_2$ под высоким давлением: эксперимент, моделирование, машинное обучение
.....**Меньшикова С. Г., Щелкачев Н. М.** 655

**ПОРЯДОК, БЕСПОРЯДОК И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ
В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ**

- Вариации обменного смещения и магнитная анизотропия пленочных структур на основе антиферромагнетика FeMn**Васьковский В. О., Быкова А. А., Горьковенко А. Н., Москалев М. Е., Лепаловский В. Н.** 665
- Влияние однородного электрического поля на вихреподобные магнитные структуры в перфорированных пленках**Магадеев Е. Б., Вахитов Р. М.** 673

Управление температурой спин-переориентационного перехода в монокристаллах ортоферритов $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$	Шайхутдинов К. А., Скоробогатов С. А., Князев Ю. В., Камкова Т. Н., Васильев А. Д., Семенов С. В., Павловский М. С., Красиков А. А.	685
Особенности анизотропии узких полосок из тонких магнитных пленок, осажденных в постоянном магнитном поле	Беляев Б. А., Боев Н. М., Скоморохов Г. В., Соловьев П. Н., Лукьяненко А. В., Горчаковский А. А., Подшивалов И. В., Изотов А. В.	700

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Влияние внешнего давления на поведение металлической фазы органического квазидвумерного проводника $\kappa\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{Hg(SCN)}_2\text{Cl}$. Вклад корреляционных эффектов	Песоцкий С. И., Любовский Р. Б., Зверев В. Н., Григорьев П. Д., Могилюк Т. И., Торунова С. А., Жилиева Е. И.	710
--	--	-----

СТАТИСТИЧЕСКАЯ И НЕЛИНЕЙНАЯ ФИЗИКА, ФИЗИКА «МЯГКОЙ» МАТЕРИИ

Поведение смесей активных и пассивных нематиков в ограниченной двумерной круглой области	Миранцев Л. В.	718
Электродинамика плазменного соленоида и электромагнитные свойства индуктивного разряда	Карташов И. Н., Кузелев М. В.	725
О воздействии потока ионов гелиевой плазмы повышенной энергии на наноструктуру вольфрама	Кулагин В. В., Цвентух М. М.	742

ЭФФЕКТЫ ИНТЕРФЕРЕНЦИИ РАЗЛИЧНЫХ КАНАЛОВ ИМПУЛЬСНОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ РЕЗОНАНСОВ КОГЕРЕНТНОГО ПЛЕНЕНИЯ НАСЕЛЕННОСТЕЙ В ЯЧЕЙКАХ С ПАРАМИ ЩЕЛОЧНОГО МЕТАЛЛА И БУФЕРНЫМ ГАЗОМ

Г. В. Волошин, К. А. Баранцев, А. Н. Литвинов*

*Санкт-Петербургский политехнический университет им. Петра Великого
195251, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 28 сентября 2023 г.,
после переработки 17 ноября 2023 г.
Принята к публикации 17 ноября 2023 г.

Построена теория возбуждения резонансов Рэмси, учитывающая полную магнитную структуру уровней D_1 -линии атомов ^{87}Rb , а также конечную температуру ансамбля. Проанализированы зависимости формы и сдвигов резонансов от таких параметров, как величина внешнего магнитного поля, степень эллиптичности лазерных полей и температура среды. Показана возможность интерференции различных каналов возбуждения резонансов Рэмси, наблюдаемая при варьировании величины магнитного поля. Также обнаружено существование оптимальной эллиптичности полей, при определенной поляризации, приводящей к наибольшей амплитуде резонансов.

DOI: 10.31857/S0044451024050018

1. ВВЕДЕНИЕ

Явление когерентного пленения населенностей (КПН) представляет собой возникновение такого суперпозиционного квантового состояния, которое не взаимодействует с лазерным излучением. Эта ситуация может быть реализована при взаимодействии бихроматического лазерного излучения с атомными ансамблями [1–4]. В спектре поглощения это проявляется как возникновение окна прозрачности, ширина которого может составлять сотни, или даже десятки герц. Наличие узкого резонанса позволяет использовать явление КПН в различных практических приложениях: оптическая магнитометрия [5–8], лазерная генерация без инверсии [9], квантовая информатика [10–12], малогабаритные стандарты частоты [13–20].

Одной из важнейших задач высокорецизионной спектроскопии является получение узких и высококонтрастных резонансов КПН. Использование непрерывной накачки лазерных источников накладывает определенные ограничения на ширину ре-

зонанса. При этом существенного сужения линии КПН-резонанса можно добиться, если реализовать импульсную накачку или схему Рэмси [21]. Суть этого метода заключается во взаимодействии атомного ансамбля с двумя последовательными импульсами (накачивающим и считывающим), разделенными темновой паузой [22]. В результате ширина КПН-резонанса определяется только темновой паузой, что позволяет добиться значительно более узкой линии резонанса КПН [22].

В настоящее время проводятся активные исследования двухфотонных резонансов (когерентное пленение населенностей и двойной радиооптический резонанс (ДРОР)) при использовании импульсной накачки. Так, авторами работы [23] описан метод стабилизации амплитуды опрашивающего микроволнового поля в компактных атомных часах на основе ДРОР при схеме опроса Рэмси. В работе [24] было показано, что интерференция Рамана–Рэмси является весьма эффективным методом реализации компактных и высокопроизводительных стандартов частоты на основе КПН в ячейках с буферным газом. В этой работе авторы теоретически исследовали резонансы Рамана–Рэмси в оптически плотных атомных парах. Возникновение сдвигов гребенки Рэмси и «обрезка» ее максимумов при схе-

* E-mail: gavriilvsh@gmail.com

ме опроса Рэмси резонанса КПН в холодном разреженном атомном ансамбле в оптически плотной среде показано в [25]. Экспериментальное исследование резонансов КПН на основе техники Рамана – Рэмси в ячейках, содержащих газовую смесь ^{87}Rb – Ar – Ne для конфигурации $\text{lin} \parallel \text{lin}$ было проведено в [26], а для ячеек с атомами ^{133}Cs — в [27]. Как сказывается влияние сверхтонкой структуры на форму резонанса КПН при схеме опроса Рэмси в холодных и горячих атомах, проанализировано в работах [28, 29]. Последовательная теория взаимодействия бихроматического лазерного излучения с оптически плотной средой щелочных атомов, имеющей ненулевую температуру, при импульсной накачке изложена в [30]. Методы подавления световых сдвигов резонансов КПН при импульсной накачке на основе автобалансной схемы экспериментально исследованы в [31]. Автобалансная схема в оптически плотной среде рассмотрена теоретически в [32]. Возможность подавления полевых сдвигов резонанса КПН методами обобщенной автобалансной спектроскопии Рэмси и комбинированного сигнала ошибки продемонстрирована в [33]. Реализовать рубидиевый квантовый стандарт частоты на основе ДРОР, использующий импульсную накачку и достигающий стабильности $2.5 \cdot 10^{-13}$ за одну секунду, удалось авторам работы [34]. Результаты работы [35] показали, что это не предел. Авторы этой работы смогли улучшить предыдущий результат и получить стабильность атомных часов, базирующихся также на ДРОР и использующих импульсную оптическую накачку «горячих» атомов, до значений $1.2 \cdot 10^{-13}$ за одну секунду [35]. В работе [36] подчеркивается, что многоимпульсная интерферометрия КПН-Рэмси является мощным инструментом для улучшения характеристик атомных часов на основе КПН. Авторами работы проведен анализ многоимпульсной интерферометрии КПН-Рэмси при произвольных последовательностях импульсов и получено обобщенное аналитическое выражение.

Резюмируя, можно видеть, что исследование КПН-резонансов при импульсной накачке является актуальным направлением. В настоящее время теоретические исследования этого направления позволили развить теорию взаимодействия лазерного импульсного излучения в условиях КПН-резонанса в «горячих» атомах в отсутствие вырождения между сверхтонкими уровнями в оптически тонких [29, 36] и оптически плотных [24, 25, 28, 30] средах. Достаточно полно построена теория КПН-резонансов в парах щелочных металлов в ячейках с буферным газом с учетом «реальной» структуры энергетиче-

ских уровней и поляризации световых волн для случая непрерывного возбуждения двухчастотным полем [37]. Однако отсутствует подобная теория КПН-резонанса для импульсной накачки. Целью настоящей работы является восполнить этот пробел и описать взаимодействие лазерного излучения с щелочными атомами, находящимися при комнатных (и выше) температурах. Одновременно с этим мы полагаем, что лазерное излучение имеет произвольную поляризацию, а активные атомы находятся во внешнем магнитном поле, что приводит к снятию вырождения между зеемановскими подуровнями.

2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Рассмотрим среду атомов ^{87}Rb в поле бихроматического лазерного излучения, квазирезонансного D_1 -линии атомов (см. рис. 1). Вектор напряженности внешнего электрического поля запишем в виде

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_1(\mathbf{r}, t) \exp\{-i(\omega_1 t - k_1 z)\} + \mathbf{E}_2(\mathbf{r}, t) \exp\{-i(\omega_2 t - k_2 z)\} + \text{с.с.}, \quad (1)$$

где ω_j , k_j — частоты и волновые вектора соответствующих частотных составляющих волны ($j = 1, 2$). Здесь

$$\mathbf{E}_j(\mathbf{r}, t) = E_j(\mathbf{r}, t) \mathbf{e}_j = E_j(\mathbf{r}, t) (p_j^+ \mathbf{e}_+ + p_j^- \mathbf{e}_-) \quad (2)$$

— комплексные амплитуды частотных составляющих электрической напряженности волн, разложенные по ковариантным циклическим ортам

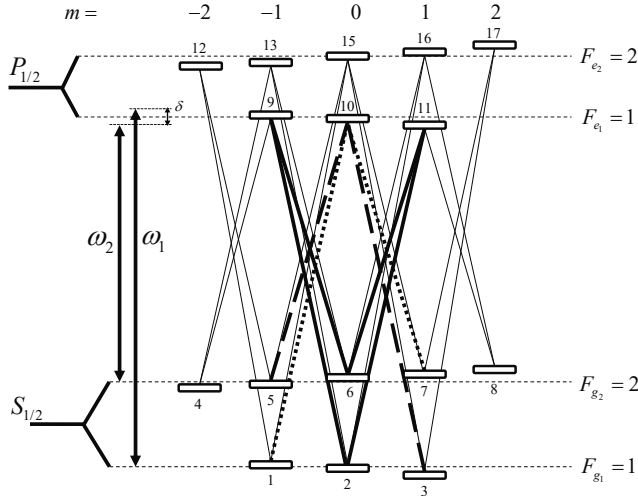
$$\mathbf{e}_{\pm} = \mathbf{e}^{\pm*} = \mp(\mathbf{e}_x \pm i\mathbf{e}_y)/\sqrt{2}$$

с коэффициентами $p_j^{\pm}$. Значения данных коэффициентов определяют состояние поляризации излучения. Отметим, что данные амплитуды связаны с интенсивностями I_j как

$$|\mathbf{E}_j| = \sqrt{2\pi I_j/c}.$$

Далее будем использовать приближение оптической тонкости среды, пренебрегая зависимостями от координат данных амплитуд. При этом будем пренебрегать возможностью некогерентного рассеяния, связанного с перепоглощением излучения в среде [38–41].

Квантовое состояние атомного ансамбля будем описывать посредством одночастичной вигнеровской матрицы плотности $\hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$. При этом мы пренебрегаем коллективными эффектами [42–44], т. е.

Рис. 1. Схема накачки D_1 -линии атома ^{87}Rb

диполь-дипольным взаимодействием между активными атомами, считая среду достаточно разреженной. Уравнение для матрицы плотности в представлении Вигнера по поступательным степеням свободы атомов запишем в виде

$$\dot{\hat{\rho}} + \mathbf{v} \nabla \hat{\rho} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] + \hat{\Gamma}(\hat{\rho}) + \hat{S}(\hat{\rho}), \quad (3)$$

где $\hat{\Gamma}$, $\hat{S}$ — супероператоры, феноменологически учитывающие спонтанный распад возбужденных состояний активных атомов и их столкновения с атомами буферного газа соответственно, $\mathbf{v}$ — вектор скорости поступательного движения атомов, $\hbar$ — приведенная постоянная Планка.

Гамильтониан системы представим в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \hbar \hat{V}, \quad (4)$$

где

$$\hat{H}_0 = \sum_n \hbar \omega_n^{at} |n\rangle \langle n|$$

— гамильтониан свободного атома, ω_n^{at} — частоты атомных уровней $|n\rangle$ ($n = 1, \dots, 16$).

Гамильтониан взаимодействия $\hat{V}$ запишем в дипольном приближении:

$$\hat{V} = \frac{\hat{\mathbf{d}} \cdot \mathbf{E}}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} [(\hat{\mathbf{d}} \cdot \mathbf{e}_1) E_1 \exp\{-i(\omega_1 t - k_1 z)\} + (\hat{\mathbf{d}} \cdot \mathbf{e}_2) E_2 \exp\{-i(\omega_2 t - k_2 z)\} + \text{H.c.}]. \quad (5)$$

Здесь $\hat{\mathbf{d}}$ — оператор вектора дипольного момента. Запишем его посредством контравариантных циклических ортов:

$$\hat{\mathbf{d}} = \hat{d}^+ \mathbf{e}^+ + \hat{d}^- \mathbf{e}^- + \hat{d}^0 \mathbf{e}_z. \quad (6)$$

Значения матричных элементов циклических компонент оператора дипольного момента для

оптических переходов можно найти, используя теорему Вигнера–Экарта [45] и теорию спонтанного распада [46]:

$$d_{e_j' g_j}^q = (-1)^{F_{g_j} + J + I - 1} \sqrt{(2J + 1)(2F_{g_j} + 1)} \times \\ \times C_{F_{g_j}, m_{g_j}, 1, q}^{F_{e_j'}, m_{e_j'}} \left\{ \begin{matrix} I & F_{e_j'} & J \\ 1 & J & F_{g_j} \end{matrix} \right\} V_0, \quad (7)$$

где

$$V_0 = \sqrt{\frac{3\hbar c^3 \gamma}{4\omega_{D_1}^3}};$$

γ — скорость спонтанного распада возбужденного состояния; ω_{D_1} — частота нерасщепленного перехода D_1 -линии; c — скорость света в вакууме; $F_{g_j}(e_j) = 1, 2$, $J = 1/2$, $I = 3/2$ — абсолютные величины полного момента атома на уровне $|g_j\rangle(|e_j\rangle)$, момента электронной оболочки на уровне $|n\rangle$ и момента ядра соответственно; m_n — значение проекции полного момента на уровне $|n\rangle$; $C_{F_g, m_g, 1, q}^{F_e, m_e}$ — коэффициенты Клебша–Гордана; фигурными скобками обозначены $6j$ -символы; $g_1 = 1, \dots, 3$; $g_2 = 4, \dots, 8$; $e_1 = 9, \dots, 11$; $e_2 = 12, \dots, 16$; $q = \pm 1$;

$$\rho_{g_j e} = \rho_{eg_j}^* = e^{i(\omega_j t - k_j z)} \tilde{\rho}_{g_j e}, \quad (8)$$

$$\rho_{g_1 g_2} = \rho_{g_2 g_1}^* = e^{i[(\omega_1 - \omega_2)t - (k_1 - k_2)z]} \tilde{\rho}_{g_1 g_2}. \quad (9)$$

Отстройки полей от соответствующих нерасщепленных переходов определим, предполагая настройку на уровни с $F_e = 1$, следующим образом:

$$\Delta_j = \omega_j - \left(\omega_{D_1} + \Delta_{e_1}^{hfs} - \Delta_{g_j}^{hfs} \right), \quad (10)$$

где Δ_n^{hfs} — частоты сверхтонких расщеплений уровней $|n\rangle$.

С учетом замен (8), (9) распишем поэлементно уравнение (3), исключая слагаемые, осциллирующие с удвоенной частотой ($\propto e^{2i(\omega_j t - k_j z)}$), в рамках приближения вращающейся волны:

$$\dot{\rho}_{gg}(\mathbf{v}) + \mathbf{v} \nabla \rho_{gg}(\mathbf{v}) = \\ = i \sum_{e=9}^{16} \left(\tilde{V}_{eg}^* \tilde{\rho}_{eg}(\mathbf{v}) - \tilde{\rho}_{ge}(\mathbf{v}) \tilde{V}_{eg} \right) + \\ + \sum_{e=9}^{16} \gamma_{eg} \rho_{ee}(\mathbf{v}) - \nu \rho_{gg}(\mathbf{v}) + \\ + \sum_{g'=1}^8 \nu_{g'g} M(\mathbf{v}) \int \rho_{g'g'}(\mathbf{v}') d^3 \mathbf{v}' + \\ + \sum_{e=9}^{16} \nu_{eg} M(\mathbf{v}) \int \rho_{ee}(\mathbf{v}') d^3 \mathbf{v}', \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{ee}(\mathbf{v}) + \mathbf{v} \nabla \rho_{ee}(\mathbf{v}) = & \\ = i \sum_{g=1}^8 \left(\tilde{V}_{eg} \tilde{\rho}_{ge}(\mathbf{v}) - \tilde{\rho}_{eg}(\mathbf{v}) \tilde{V}_{eg}^* \right) - & \\ - (\gamma + \nu) \rho_{ee}(\mathbf{v}) + & \\ + \sum_{e'=9}^{16} \nu_{e'e} M(\mathbf{v}) \int \rho_{e'e'}(\mathbf{v}') d^3 \mathbf{v}', & \quad (12) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{g_j e}(\mathbf{v}) + \mathbf{v} \nabla \tilde{\rho}_{g_j e}(\mathbf{v}) = & \\ = -i(\Delta_j + \Delta_{g_j e} - \mathbf{k}_j \cdot \mathbf{v}) \tilde{\rho}_{g_j e}(\mathbf{v}) + & \\ + i \sum_{g'_j} \rho_{g_j g'_j}(\mathbf{v}) \tilde{V}_{eg'_j}^* - \left(\frac{\gamma}{2} + \nu \right) \tilde{\rho}_{g_j e}(\mathbf{v}), & \quad (13) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{g_1 g_2}(\mathbf{v}) + \mathbf{v} \nabla \tilde{\rho}_{g_1 g_2}(\mathbf{v}) = & \\ = i \sum_{e=9}^{16} \left(\tilde{V}_{eg_1}^* \tilde{\rho}_{eg_2}(\mathbf{v}) - \tilde{\rho}_{g_1 e}(\mathbf{v}) \tilde{V}_{eg_2} \right) - & \\ - i(\Delta_1 - \Delta_2 + \Delta_{g_1 g_2} - \mathbf{q} \cdot \mathbf{v}) \tilde{\rho}_{g_1 g_2}(\mathbf{v}) - & \\ - \nu \tilde{\rho}_{g_1 g_2}(\mathbf{v}) + \nu_{S_{1/2}}^{rf} M(\mathbf{v}) \int \tilde{\rho}_{g_1 g_2}(\mathbf{v}') d^3 \mathbf{v}', & \quad (14) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{g_j g'_j}(\mathbf{v}) + \mathbf{v} \nabla \rho_{g_j g'_j}(\mathbf{v}) = & \\ = i \sum_{e=9}^{16} \left(\tilde{V}_{eg_j}^* \tilde{\rho}_{eg'_j}(\mathbf{v}) - \tilde{\rho}_{g_j e}(\mathbf{v}) \tilde{V}_{eg'_j} \right) + & \\ + i \omega_{g_j g'_j} \rho_{g_j g'_j}(\mathbf{v}) - \nu \rho_{g_j g'_j}(\mathbf{v}) + & \\ + \nu_{S_{1/2}}^{ee} M(\mathbf{v}) \int \rho_{g_j g'_j}(\mathbf{v}') d^3 \mathbf{v}', \quad g'_j \neq g_j. & \quad (15) \end{aligned}$$

Здесь введены обозначения

$$\begin{aligned} \Delta_{g_j e_i} &= \Delta_{e_i}^{hfs} + \Delta_{g_j}^{mag} - (\Delta_{e_i}^{hfs} + \Delta_{e_i}^{mag}), \\ \Delta_{g_1 g_2} &= \Delta_{g_1}^{mag} - \Delta_{g_2}^{mag}, \end{aligned}$$

Δ_n^{mag} — частоты магнитных расщеплений уровней $|n\rangle$ (оцениваются по формуле Брейта–Раби [47] с точностью до квадратичного по магнитному полю члена);

$$M(\mathbf{v}) = (\sqrt{\pi} v_T)^{-3} \exp(-\mathbf{v}^2/v_T^2)$$

— распределение Максвелла, v_T — наиболее вероятная тепловая скорость; γ — скорость распадов возбужденных состояний; γ_{eg} — скорости распадов возбужденных уровней $|e\rangle$ на уровни $|g\rangle$;

$$\tilde{V}_{eg_j} = (d_{eg_j} e_j) E_j / \hbar$$

— обобщенные частоты Раби соответствующих переходов; ν_{nm} — частоты столкновений, приводящих к переходам $|n\rangle \rightarrow |m\rangle$; ν — полная частота столкновений; $\nu_{S_{1/2}}^{rf}$, $\nu_{S_{1/2}}^{ee}$ — частоты столкновений, при которых не происходит разрушения радиочастотных

и зеемановских когерентностей между подуровнями $S_{1/2}$ -состояний соответственно (последняя в расчетах полагается равной ν); $\omega_{nm} = \omega_m - \omega_n$; $g = 1, \dots, 8$, $e = 9, \dots, 16$. Здесь интегралы столкновений записаны в модели сильных столкновений [48], а уравнения для когерентностей между подуровнями возбужденного состояния $\tilde{\rho}_{ee'}$ отброшены в рамках адиабатического приближения ($\tilde{V}_{eg} \ll \nu$). Значения констант для атома ^{87}Rb заимствованы из работы [47].

Используя модель, в которой атомные населенности после столкновений оказываются равномерно перемешанными по основному и возбужденному мультиплетам [48], свяжем частоты ν_{nm} с полной частотой столкновений ν следующим образом:

$$\begin{aligned} \nu_{g'g} &= \begin{cases} \nu(1 - \eta^{rf}), & g' = g, \\ \frac{\eta^{rf} \nu}{N_{S_{1/2}} - 1}, & g' \neq g, \end{cases} \\ \nu_{e'e} &= \begin{cases} \nu(1 - \eta^{rf} - \eta^{opt}), & e' = e, \\ \frac{\eta^{rf} \nu}{N_{P_{1/2}} - 1}, & e' \neq e, \end{cases} \end{aligned} \quad (16)$$

где $N_{S_{1/2}} = N_{P_{1/2}} = 8$ — количества подуровней $S_{1/2}$ - и $P_{1/2}$ -состояний соответственно; η^{rf} , η^{rf} — доли столкновений, приводящих к перемешиванию населенностей между подуровнями основного и возбужденного состояний соответственно; η^{opt} — доля столкновений, приводящих к тушению возбуждения. Величину ν можно оценить исходя из газокинетической формулы $\nu = (n_a + n_{buf}) \sigma \bar{u}$, где n_a — концентрация активных атомов, n_{buf} — концентрация буферного газа, σ — сечение соответствующего процесса, $\bar{u} = \sqrt{8kT/\pi\mu}$ — средняя тепловая скорость, μ — приведенная масса активного атома и атома буферного газа. Отметим, что концентрация атомов буферного газа n_{buf} в ансамбле много больше концентрации активных атомов n_a . В силу этой зависимости частоты ν от температуры можно пренебречь, так как от последней зависит только концентрация n_a .

Будем ограничиваться приближениями плоского фронта волны, малости дифракции поля на краях среды, а также однородности ее оптических свойств. Кроме того, будем пренебрегать эффектами диффузии, считая, что длина диффузии за время возбуждения τ_e много меньше характерных размеров среды L : $\sqrt{D\tau_e} \ll L$, где D — коэффициент диффузии. Все это позволяет пренебречь зависимостью матрицы плотности от координат в поперечных лазерному лучу направлениях $\hat{\rho} = \hat{\rho}(\mathbf{v}, z, t)$.

Перейдем к редуцированной матрице плотности

$$\bar{\rho}_{nm}(z, t) = \int \rho_{nm}(\mathbf{v}, z, t) d^3\mathbf{v}$$

(символ « $\sim$ » над буквой для случаев $n \neq m$ опущен) путем интегрирования уравнений по скоростям. При этом, используя приближение слабых полей, скоростные зависимости населенностей основных состояний $\rho_{gg}(\mathbf{v})$ и когерентностей между магнитными $\rho_{g_j g'_j}(\mathbf{v})$ и сверхтонкими $\rho_{g_1 g_2}(\mathbf{v})$ подуровнями основного состояния можно приближенно считать максвелловскими [29]:

$$\rho_{gg'}(\mathbf{v}, z, t) = M(\mathbf{v}) \bar{\rho}_{gg'}(z, t). \quad (17)$$

Данное приближение обусловлено предполагаемыми узостью линии лазера в сравнении с доплеровской шириной, малыми по сравнению с γ частотами Раби, а также длительным временем жизни когерентностей между подуровнями основного состояния. В результате интегрирования для уравнений (11), (12), (14), (15) получим

$$\begin{aligned} \dot{\bar{\rho}}_{g_j g_j} = & i \sum_{e=9}^{16} \left(\tilde{V}_{eg_j}^* \bar{\rho}_{eg_j} - \bar{\rho}_{g_j e} \tilde{V}_{eg_j} \right) + \\ & + \frac{\gamma'}{N_{S_{1/2}}} \bar{\rho}_{exc} - \eta^{rf} \nu \bar{\rho}_{g_j g_j} + \\ & + \frac{\eta^{rf} \nu}{N_{S_{1/2}} - 1} \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^8 \bar{\rho}_{g' g'}, \quad (18) \end{aligned}$$

$$\dot{\bar{\rho}}_{exc} = i \sum_{e=9}^{16} \sum_{g=1}^8 \left(\tilde{V}_{eg} \bar{\rho}_{ge} - \bar{\rho}_{eg} \tilde{V}_{eg}^* \right) - \gamma' \bar{\rho}_{exc}, \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \dot{\bar{\rho}}_{g_1 g_2} = & i \sum_{e=9}^{16} \left(\tilde{V}_{eg_1}^* \bar{\rho}_{eg_2} - \bar{\rho}_{g_1 e} \tilde{V}_{eg_2} \right) - \\ & - (i(\Delta_1 - \Delta_2 + \Delta_{g_1 g_2}) + \gamma_{12}) \bar{\rho}_{g_1 g_2}, \quad (20) \end{aligned}$$

$$\dot{\bar{\rho}}_{g_j g'_j} = i \sum_{e=9}^{16} \left(\tilde{V}_{eg_j}^* \bar{\rho}_{eg'_j} - \bar{\rho}_{g_j e} \tilde{V}_{eg'_j} \right) + i \omega_{g_j g'_j} \bar{\rho}_{g_j g'_j}, \quad (21)$$

где

$$\bar{\rho}_{exc} = \sum_e \bar{\rho}_{ee}$$

— суммарная населенность возбужденных состояний; $\gamma' = \gamma + \nu \eta^{opt}$ — модифицированная за счет столкновений скорость распадов возбужденных состояний; $\gamma_{12} = \nu - \nu_{S_{1/2}}^{rf}$ — скорость столкновительных распадов радиочастотных когерентностей между сверхтонкими подуровнями основного состояния. При получении данных уравнений слагаемые с градиентами в левых частях уравнений (11), (12),

(14), (15), а также слагаемое в (14), учитывающее остаточный доплеровский сдвиг qv , исчезают вследствие приближения (17). Здесь при получении уравнения (18) мы ограничились рассмотрением случая полной столкновительной деполаризации возбужденного состояния, предполагая $\eta^{rf} \nu \gg \gamma'$, что имеет место для относительно высоких давлений буферного газа [37, 49, 50]. Отметим, что для таких давлений столкновительное уширение линии становится соизмеримо с частотой сверхтонкого расщепления возбужденного состояния.

В уравнении (13) переход к редуцированным элементам матрицы плотности путем интегрирования уравнений по скоростям аналитически невозможен ввиду наличия доплеровских слагаемых, пропорциональных $\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{v}$. Поэтому сначала выразим оптические когерентности через квадратуры и затем проинтегрируем по скоростям:

$$\begin{aligned} \bar{\rho}_{g_j e_i}(t) = & i \int_0^t dt' \sum_{g'_j} \bar{\rho}_{g_j g'_j}(t') \tilde{V}_{e_i g'_j}^*(t') \times \\ & \times \int d^3\mathbf{v} M(\mathbf{v}) \times \\ & \times \exp[-(i(\Delta_j + \Delta_{g_j e_i} - \mathbf{k}_j \cdot \mathbf{v}) + \Gamma')(t - t')], \quad (22) \end{aligned}$$

где

$$\Gamma' = \gamma/2 + \nu.$$

Выполняя в (22) интегрирование по скорости, получим

$$\begin{aligned} \bar{\rho}_{g_j e_i}(t) = & i \int_0^t dt' \times \\ & \times \exp \left[-\frac{v_T^2 \mathbf{k}_j^2}{4} (t - t')^2 - (i\Delta_j + i\Delta_{g_j e_i} + \Gamma')(t - t') \right] \times \\ & \times \sum_{g'_j} \bar{\rho}_{g_j g'_j}(t') \tilde{V}_{e_i g'_j}^*(t'). \quad (23) \end{aligned}$$

Подстановкой (23) в (18)–(21) получаем систему интегриродифференциальных уравнений Вольтерры второго рода, которая допускает дальнейшее численное решение.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

В данной работе исследуются резонансы КПН, детектируемые двумя прямоугольными импульсами разнесенными во времени темновой паузой (рис. 2). При этом длительность первого накачивающего импульса предполагается много больше времени установления стационарного состояния КПН, что позволяет использовать стационарное решение системы (18)–(21) в момент окончания накачивающего

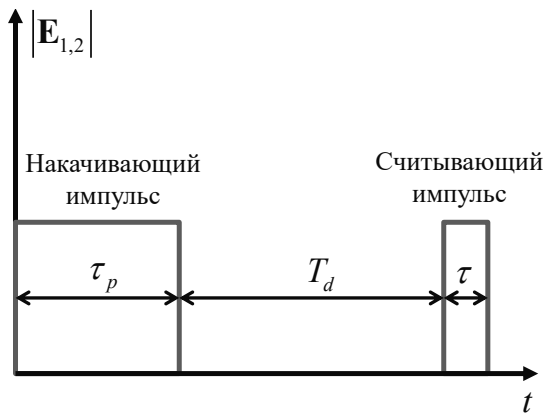


Рис. 2. Последовательность импульсов накачки

импульса. Длительность темновой паузы предполагается много больше времен распадов всех оптических когерентностей и населенностей возбужденных уровней.

Вычисляя зависимость суммарной населенности возбужденных уровней от двухфотонной отстройки $\bar{\rho}_{exc}(\delta)$ в конце считывающего импульса, получим спектр КПН-резонансов, детектируемых методом Рэмси. Для удобства анализа будем рассматривать контраст резонанса, величину которого определим следующим образом:

$$C(\delta) = 1 - \frac{\bar{\rho}_{exc}(\delta)}{\bar{\rho}_{exc}(\delta_{off})},$$

где δ_{off} — значение двухфотонной отстройки вне резонанса КПН.

Проанализируем влияние на спектр резонансов КПН-Рэмси магнитного поля и сделаем это для двух известных поляризационных конфигураций полей $lin \perp lin$ [51] и $lin \parallel lin$ [52]. На рис. 3 видно, что амплитуда резонансов Рэмси оказывается меньше амплитуды резонансов, детектируемых непрерывным излучением. Это объясняется распадом низкочастотных когерентностей между подуровнями основного состояния в процессе темновой паузы. Таким образом, увеличение длительности темновой паузы приводит, с одной стороны, к сужению резонансов, но с другой, — к уменьшению их амплитуды. Увеличение магнитного поля позволяет выделить в гребенке Рэмси отдельные максимумы огибающей, отвечающие КПН-резонансам на радиочастотных переходах $|1\rangle \leftrightarrow |7\rangle$, $|2\rangle \leftrightarrow |6\rangle$ и $|3\rangle \leftrightarrow |5\rangle$, положения которых даются разностями магнитных сдвигов соответствующих переходов: Δ_{71} , Δ_{62} и Δ_{53} . При этом резонанс на радиочастотном переходе $|2\rangle \leftrightarrow |6\rangle$ (жирные линии на рис. 1) отсутствует для конфигурации $lin \parallel lin$, вследствие деструктивной интерференции двух лямбда-схем на данном переходе, как это было показано в [53].

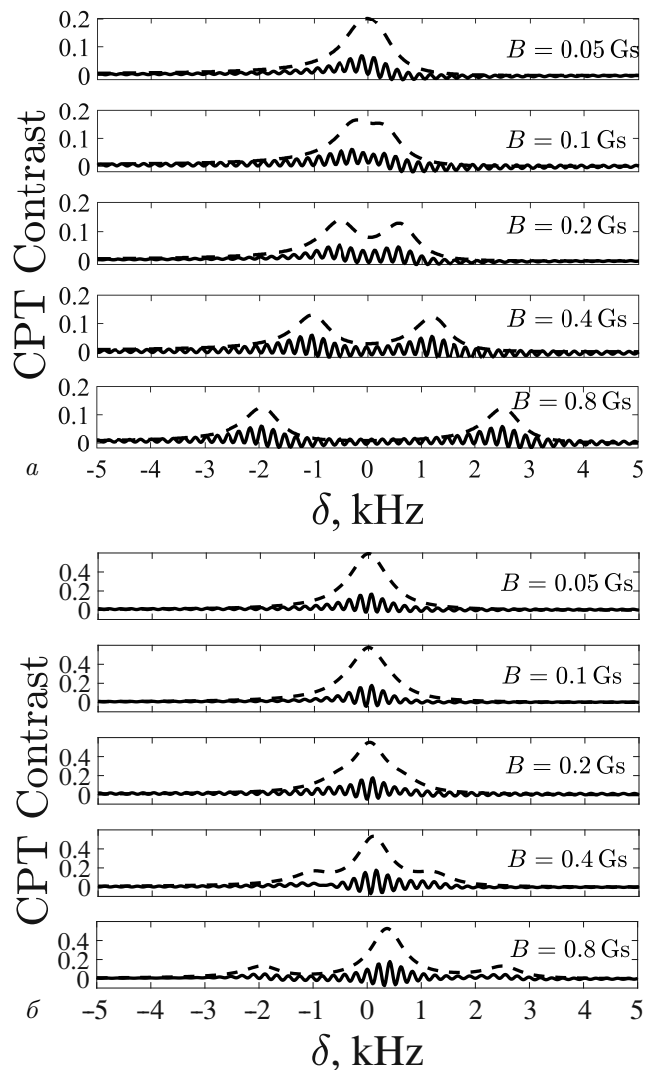


Рис. 3. Зависимости контрастных спектров КПН-резонансов от магнитного поля, детектируемых методом Рэмси (сплошные кривые) и непрерывным излучением (штриховые кривые), для конфигураций $lin \perp lin$ (а) и $lin \parallel lin$ (б). Параметры расчета: $I_1 = I_2 = 0.2$ мВт/см², $T = 40^\circ\text{C}$, $T_d = 5$ мс, $\gamma_{12} = 250$ с⁻¹, $\eta^{opt} = 0.2$, $\eta^{rf} = 2\gamma_{12}/\nu$, $n_{buf} = 4 \cdot 10^{18}$ см⁻³, буферный газ — азот

Проанализируем изменение формы резонансов Рэмси при увеличении магнитного поля более детально. Рисунок 4 демонстрирует немонотонную зависимость амплитуды резонансов Рэмси от магнитного поля. В частности, при некоторых значениях магнитного поля амплитуда резонансов достигает локального минимума. Этот результат вполне согласуется с экспериментальными данными [54] и объясняется деструктивной интерференцией различных каналов возбуждения КПН-резонансов Рэмси. В процессе темновой паузы низкочастотные когерентности $\bar{\rho}_{g_1 g_2}$ меняют фазу на величину $(\delta + \Delta_{g_1 g_2})T_d$. Если к концу темновой паузы различные когерент-

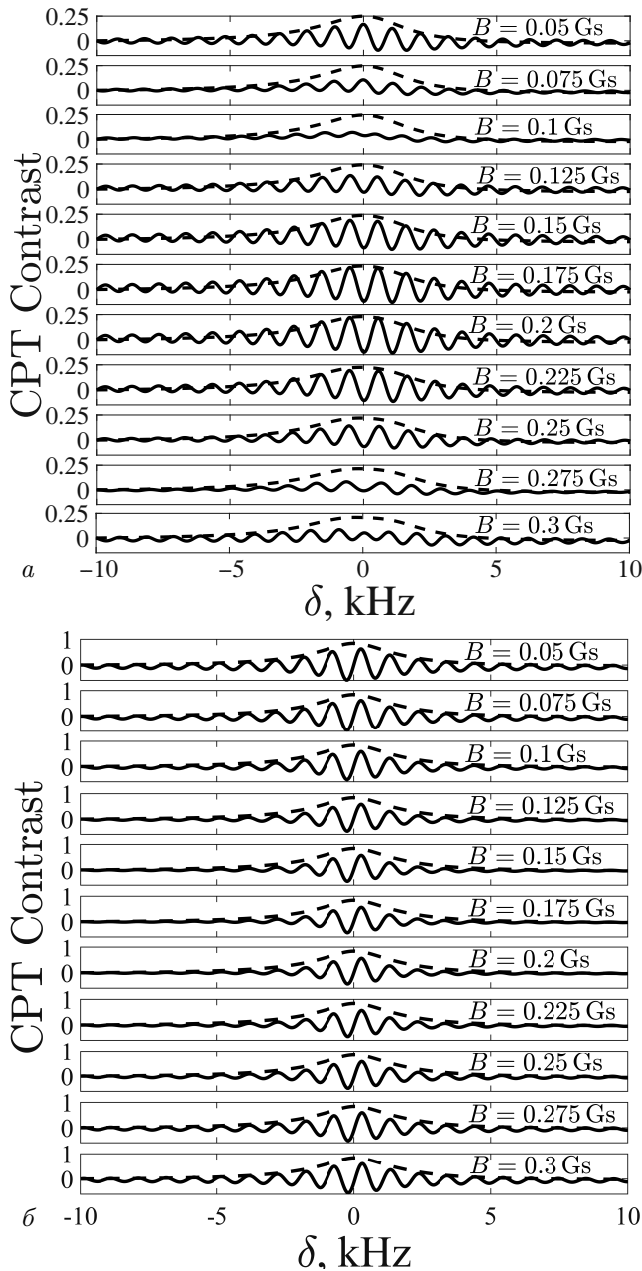


Рис. 4. Зависимости контрастных спектров КПН-резонансов от магнитного поля, детектируемых методом Рэмси (сплошные кривые) и непрерывным излучением (штриховые кривые), для конфигураций $lin \parallel lin$ (а) и $lin \perp lin$ (б). Параметры расчета: $I_1 = I_2 = 1 \text{ мВт/см}^2$, $T = 40^\circ\text{C}$, $T_d = 1 \text{ мс}$. Остальные параметры те же, что в подписи к рис. 3

ности двух рабочих подуровней $g_1 g_2$ и $g'_1 g'_2$ оказались в противофазе, т. е. выполнилось условие

$$(\Delta_{g_1 g_2} - \Delta_{g'_1 g'_2}) T_d = \pi(2p - 1), \quad p = 1, 2, \dots, \quad (24)$$

то соответствующие лямбда-схемы будут ослаблять

друг друга. Так, используя выражение (24), получим, что при $T_d = 1 \text{ мс}$ лямбда-схемы на переходах $|1\rangle \leftrightarrow |7\rangle$ и $|3\rangle \leftrightarrow |5\rangle$ будут ослаблять друг друга для $B \approx 0.09, 0.27, 0.45, \dots \text{ Гс}$, что хорошо видно на рис. 4а, так как для конфигураций $lin \parallel lin$ резонанс на переходе $|2\rangle \leftrightarrow |6\rangle$ отсутствует. Примечательно, что в данном случае при переходе через данные значения магнитного поля центральный пик меняет свою выпуклость. В конфигурации $lin \perp lin$ основной вклад в ослабление амплитуды гребенки Рэмси вносят совместно интерференции между лямбда-схемами на радиочастотных переходах $|1\rangle \leftrightarrow |7\rangle$ и $|2\rangle \leftrightarrow |6\rangle$, а также $|2\rangle \leftrightarrow |6\rangle$ и $|3\rangle \leftrightarrow |5\rangle$. Таким образом, из (24) получим, что при $T_d = 1 \text{ мс}$ минимальная амплитуда впервые достигается в интервале $B \in 0.09\text{--}0.18$. Однако в связи с тем, что резонанс на переходе $|2\rangle \leftrightarrow |6\rangle$ является значительно более амплитудным, интерференционный вклад соседних резонансов в данном случае оказывается мал, и на рис. 4б амплитуда изменяется крайне слабо. Таким образом, амплитуда резонансов Рэмси для конфигурации $lin \perp lin$ менее чувствительна к изменению магнитного поля. Отметим, что в формуле (24) пренебрегается влиянием светового сдвига.

На рис. 5 показано, как меняется гребенка Рэмси при переходе от конфигурации $lin \perp lin$ к правой циркулярной поляризации обоих полей. Видно, что в огибающей гребенки Рэмси при увеличении эллиптичности остается только один минимум, соответствующий резонансу на переходе $|2\rangle \leftrightarrow |6\rangle$. Амплитуда резонансов при этом уменьшается, вследствие образования «кармана» на уровне $|8\rangle$, что делает использование циркулярной поляризации при возбуждении КПН менее выгодным. Из рис. 5а,б видно, что это имеет место как для короткой $T_d = 1$, так и для длительной $T_d = 5$ темновой паузы.

На рис. 6а представлено сравнение поведений резонансов Рэмси при увеличении эллиптичности для конфигураций $\sigma^+ \sigma^+$ и $\sigma^+ \sigma^-$ при изначальной конфигурации $lin \parallel lin$. Видно, что при переходе к циркулярным поляризациям в огибающей резонансов остается пик, в случае $\sigma^+ \sigma^-$ соответствующий КПН-резонансу на переходе $|2\rangle \leftrightarrow |6\rangle$, а в случае $\sigma^+ \sigma^+$ — на переходе $|1\rangle \leftrightarrow |7\rangle$. Отметим, что положение последнего несколько отличается от величины Δ_{71} , вследствие влияния светового сдвига. При этом амплитуда центрального относительно экстремума огибающей резонанса меняется с изменением эллиптичности немонотонно, имея выраженный максимум в окрестности $\pi/8$ для случая конфигурации $\sigma^+ \sigma^-$ (рис. 6б). Таким образом, для конфигурации $\sigma^+ \sigma^-$ существует оптимальная эллиптич-

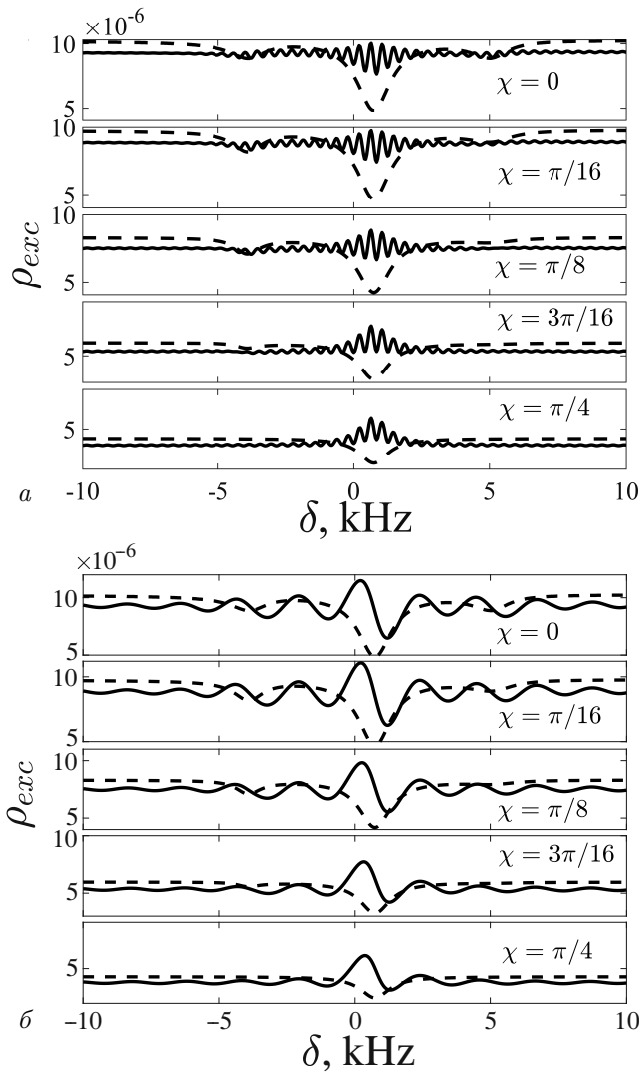


Рис. 5. Зависимости спектров КПН-резонансов, детектируемых методом Рэмси (сплошные кривые) и непрерывным излучением (штриховые кривые), от показателя эллиптичности χ при переходе от конфигурации $lin \perp lin$ к правой циркулярной поляризации обоих полей для $T_d = 5$ мс (а), 1 мс (б). Параметры расчета: $I_1 = I_2 = 0.2$ мВт/см², $T = 40^\circ\text{C}$, $B = 0.8$ Гс. Остальные параметры те же, что в подписи к рис. 3

ность, в которой резонанс имеет наилучший параметр качества. Данный эффект можно также объяснить влиянием интерференции различных Λ -схем. Как отмечалось выше, при конфигурации $lin \parallel lin$ резонанс на радиочастотном переходе $|2\rangle \leftrightarrow |6\rangle$ отсутствует. При переходе к циркулярной поляризации $\sigma^+\sigma^+$ наблюдается только одно из его плеч, вследствие правил отбора. Однако при промежуточных значениях эллиптичности между $lin \parallel lin$ - и $\sigma^+\sigma^+$ -поляризациями второе плечо сдвоенной Λ -схемы на переходе $|2\rangle \leftrightarrow |6\rangle$ проявляется, внося конструктивный вклад в спектр при малых значениях

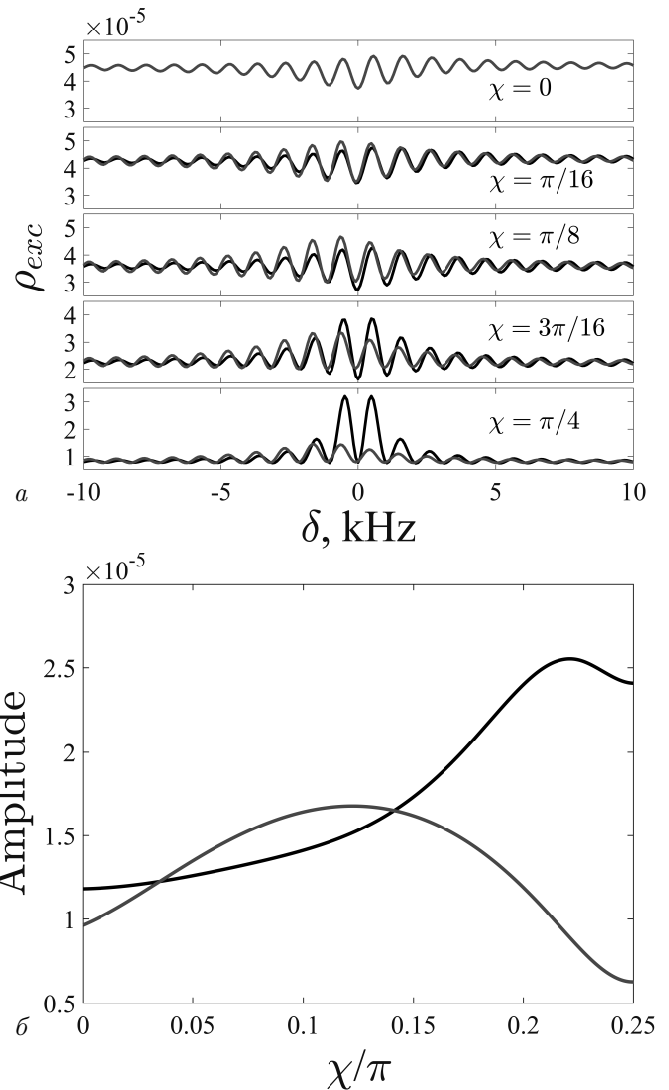


Рис. 6. Зависимости спектров (а) и амплитуд (б) КПН-резонансов, детектируемых методом Рэмси, от показателя эллиптичности двух право-циркулярно поляризованных волн ($\sigma^+\sigma^+$) (синяя кривая) и одной право- и другой лево-циркулярно поляризованных волн ($\sigma^+\sigma^-$) (черная кривая) при конфигурации $lin \parallel lin$ для $\chi = 0$. Параметры расчета: $I_1 = I_2 = 1$ мВт/см², $T = 40^\circ\text{C}$, $T_d = 1$ мс, $B = 0.05$ Гс. Остальные параметры те же, что в подписи к рис. 3

магнитного поля. Стоит отметить, что при значениях магнитного поля, удовлетворяющих условию деструктивной интерференции (24), изменение эллиптичности будет приводить к обратному эффекту.

Проанализируем поведение светового сдвига центрального резонанса Рэмси. Из рис. 7а видно, что зависимость сдвига от температуры в указанном диапазоне близка к линейной, что согласуется с результатами работы [29], где такое поведение объяснялось температурным уширением дисперсионного контура. При этом изменение магнитного поля приводит к изменению угла наклона зависимости, вследствие

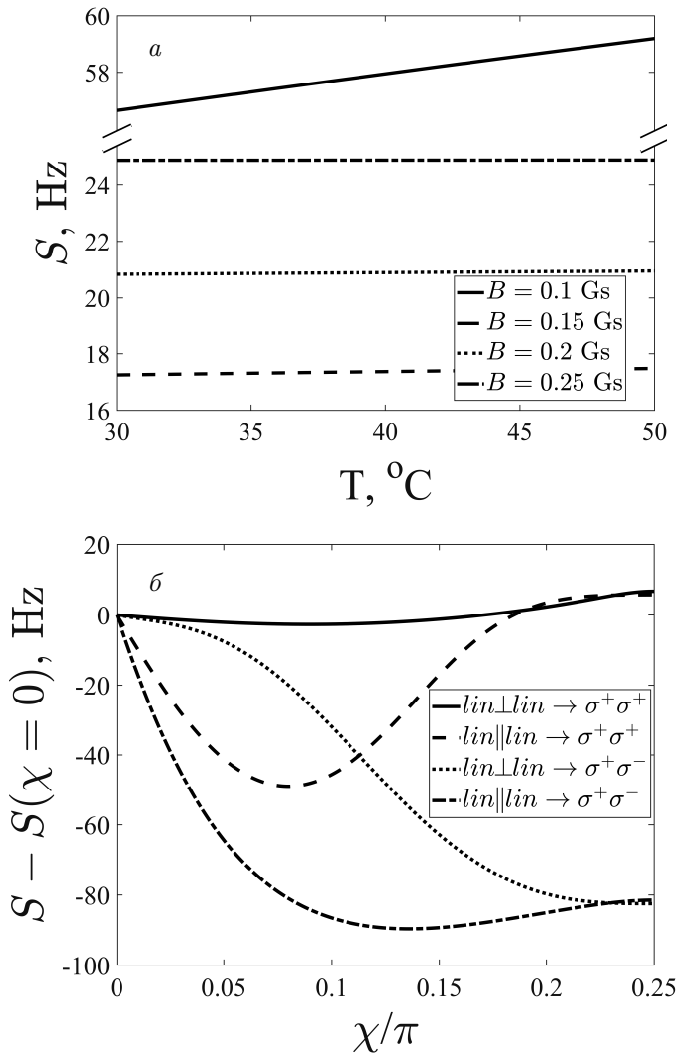


Рис. 7. Зависимости сдвига центрального резонанса КРН S , детектируемого методом Рэмси, от температуры при различных величинах магнитного поля B для конфигурации $\text{lin} \parallel \text{lin}$ (а) и от эллиптичности при переходе к различным конфигурациям циркулярных поляризаций (б). Параметры расчета: $I_1 = I_2 = 1 \text{ мВт/см}^2$, $T = 40^{\circ}\text{C}$, $T_d = 1 \text{ мс}$. Остальные параметры те же, что в подписи к рис. 3

зеemanовских сдвигов рабочих подуровней. Таким образом, выбором величины магнитного поля оказывается возможно подавить зависимость сдвига от температуры. На рис. 7б представлены зависимости относительного сдвига центрального резонанса Рэмси от степени эллиптичности полей при переходе от линейных поляризаций к циркулярным. Видно, что ход данных зависимостей становится более пологим в окрестности $\pi/4$, что объясняется изотропностью системы в поперечной лазерному лучу плоскости. Таким образом, резонансы, возбуждаемые циркулярно поляризованными полями, оказываются ме-

нее чувствительны к флуктуациям эллиптичности по сравнению с резонансами, возбуждаемыми линейно поляризованными полями, как по амплитуде (рис. 6б), так и по сдвигу (рис. 7б).

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе на основе метода матрицы плотности в вигнеровском представлении по поступательным степеням свободы атомов построена теория возбуждения резонансов когерентного пленения населенности, детектируемых методом импульсного возбуждения Рэмси в газовых ячейках с парами ^{87}Rb . Построенная теория учитывает полную магнитную структуру уровней D_1 -линии ^{87}Rb и может быть использована при анализе других нестационарных эффектов, возникающих при взаимодействии резонансного бихроматического излучения с парами атомов ^{87}Rb . Рассчитаны спектры резонансов КРН-Рэмси и изучена зависимость их формы и сдвигов от различных параметров накачки, таких как величина внешнего магнитного поля, степень эллиптичности частотных компонент излучения и температура среды. Установлено, что имеет место интерференция различных каналов возбуждения резонансов Рэмси, проявляющаяся как немонотонное изменение амплитуды резонансов в зависимости от величины магнитного поля. Предложены выражения для оценки областей параметров, реализующих деструктивную интерференцию, приводящую к минимальным значениям амплитуд резонансов. Обнаружено существование оптимальной по амплитуде резонансов эллиптичности внешних полей при использовании $\sigma^+ \sigma^-$ -конфигурации. При анализе сдвигов резонансов была показана возможность подавления зависимостей этих сдвигов от температуры и эллиптичности путем подбора определенных значений магнитного поля и поляризаций соответственно.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 21-72-10004 (разработка численных алгоритмов решения систем интегродифференциальных уравнений). Г. В. Волошин благодарит Фонд развития теоретической физики и математики «БАЗИС» за поддержку выполненных в рамках данной работы исследований особенностей влияния температуры ансамбля и связанного с этим движения атомов на коллективные эффекты, обусловленные конечной оптической толщиной (грант № 21-1-1-36-1), и руководителя соответствующего проекта И. М. Соколова.

ЛИТЕРАТУРА

1. G. Alzetta et al., *Nuovo Cim. B* **36**, 5 (1976).
2. E. Arimondo and G. Orriols, *Lett. Nuovo Cim.* **17**, 333 (1976).
3. H. R. Gray, R. M. Whitley, and C. R. Stroud, Jr., *Opt. Lett.* **3**, 218 (1978).
4. Б. Д. Агапьев, М. Б. Горный, Б. Г. Матисов и др., *УФН* **163**, 1 (1993).
5. A. Akulshin, A. Celikov, and V. Velichansky, *Opt. Commun.* **84**, 139 (1991).
6. P. D. D. Schwindt, S. Knappe, V. Shah, L. Hollberg, and J. Kitching, *Appl. Phys. Lett.* **85**, 6409 (2004).
7. R. Mhaskar, S. Knappe, and J. Kitching, *A Low-Power, High-Sensitivity Micromachined Optical Magnetometer*, *Appl. Phys. Lett.* **101**, 241105 (2012).
8. V. Andryushkov, D. Radnatarov, and S. Kobtsev, *Appl. Opt.* **61**, 3604 (2022).
9. O. Kocharovskaya and Ya. I. Khanin, *Pis'ma v Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **48**, 581 (1988).
10. M. D. Lukin, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 457 (2003).
11. M. Fleischhauer, A. Imamoglu, and J. P. Marangos, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 633 (2005).
12. R. Zhang and X.-B. Wang, *Phys. Rev. A* **94**, 063856 (2016).
13. J. Vanier, *Appl. Phys. B* **81**, 421 (2005).
14. С. А. Зибров, В. Л. Величанский, А. С. Зибров и др., *Письма в ЖЭТФ* **82**, 534 (2005).
15. S. A. Zibrov, I. Novikova, D. F. Phillips et al., *Phys. Rev. A* **81**, 013833 (2010).
16. J. Kitching, *Chip-Scale Atomic Devices*, *Appl. Phys. Rev.* **5**, 031302 (2018).
17. S. Kobtsev, S. Donchenko, S. Khripunov, D. Radnatarov, I. Blinov, and V. Palchikov, *Opt. Laser Technol.* **119**, 105634 (2019).
18. М. Н. Скворцов, С. М. Игнатович, В. И. Вишняков и др., *КЭ* **50**, 576 (2020).
19. M. Petersen, M. A. Hafiz, E. de Clercq, and Ro. Boudot, *JOSA B* **39**, 910 (2022).
20. G. D. Martinez, C. Li, A. Staron et al., *Nat. Commun.* **14**, 3501 (2023).
21. N. F. Ramsey, *Phys. Rev.* **76**, 996 (1949).
22. Ф. Риле, *Стандарты частоты. Принципы и приложения*, Физматлит, Москва (2009).
23. M. Gozzelino, S. Micalizio, F. Levi, A. Godone, and C. E. Calosso, *IEEE Trans. on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control* **65** (2018).
24. S. Micalizio and A. Godone, *Phys. Rev. A* **99**, 043425 (2019).
25. К. А. Баранцев, Е. Н. Попов, А. Н. Литвинов, *КЭ* **7**, 615 (2018).
26. В. Н. Барышев, Г. В. Осипенко, М. С. Алейников, И. Ю. Блинов, *КЭ* **49**, 283 (2019).
27. P.-F. Cheng, J.-W. Zhang, and L.-J. Wang, *Chinese Phys. B* **28**, 070601 (2019).
28. Г. В. Волошин, К. А. Баранцев, Е. Н. Попов, А. Н. Литвинов, *ЖЭТФ* **156**, 5 (2019).
29. Г. В. Волошин, К. А. Баранцев, А. Н. Литвинов, *КЭ* **50**, 1023 (2020).
30. Г. В. Волошин, К. А. Баранцев, А. Н. Литвинов, *КЭ* **52**, 108 (2022).
31. M. A. Hafiz, C. Carlé, N. Passilly, J. M. Danet, C. E. Calosso, and R. Boudot, *Appl. Phys. Lett.* **120**, 064101 (2022).
32. K. A. Barantsev and A. N. Litvinov, *JOSA B* **39**, 230 (2022).
33. Д. В. Коваленко, М. Ю. Басалаев, В. И. Юдин, Т. Занон-Виллет, А. В. Тайченачев, *КЭ* **51**, 495 (2021).
34. В. Н. Барышев, Г. В. Осипенко, А. В. Новоселов, А. Г. Суховерская и др., *КЭ* **52**, 538 (2022).
35. M. Gozzelino, S. Micalizio, C. E. Calosso et al., *arXiv:2308.15249v1 [physics.atom-ph]*.
36. R. Fang, C. Han, B. J. Lu, and C. Lee, *arXiv:2303.07118v1 [physics.atom-ph]*.
37. A. V. Taichenachev, V. I. Yudin, R. Wynands, M. Stahler, J. Kitching, and L. Hollberg, *Phys. Rev. A* **67**, 033810 (2003).
38. D. V. Kupriyanov, I. M. Sokolov, N. V. Larionov, P. Kulatunga, C. I. Sukenik, S. Balik, and M. D. Havey, *Phys. Rev. A* **69**, 033801 (2004).
39. V. M. Datsyuk, I. M. Sokolov, D. V. Kupriyanov, and M. D. Havey, *Phys. Rev. A* **74**, 043812 (2006).
40. V. M. Datsyuk, I. M. Sokolov, D. V. Kupriyanov, and M. D. Havey, *Phys. Rev. A* **77**, 033823 (2008).
41. A. S. Kuraptsev, I. M. Sokolov, and M. D. Havey, *Phys. Rev. A* **96**, 023830 (2017).

42. Ya. A. Fofanov, A. S. Kuraptsev, I. M. Sokolov, and M. D. Havey, *Phys. Rev. A* **84**, 053811 (2011).
43. A. S. Kuraptsev and I. M. Sokolov, *Phys. Rev. A* **90**, 012511 (2014).
44. Y. A. Fofanov, I. M. Sokolov, R. Kaiser, and W. Guerin, *Phys. Rev. A* **104**, 02370 (2021).
45. Д. А. Варшалович, А. Н. Москалев, В. К. Херсонский, *Квантовая теория углового момента*, Наука, Ленинград (1975).
46. V. Weisskopf, *Naturwissenschaften* **23**, 631 (1935).
47. С. Г. Раутиан, Г. И. Смирнов, А. М. Шалагин, *Нелинейные резонансы в спектрах атомов и молекул*, Наука, Новосибирск (1979).
48. D. A. Steck, *Rubidium 87 D Line Data*, <http://steck.us/alkalidata> (revision 2.2.1, 21 November 2019).
49. W. Happer, *Rev. Mod. Phys.* **44**, 169 (1972).
50. K. M. Sabakar, M. I. Vaskovskaya, D. S. Chuchelov, E. A. Tsygankov, V. V. Vassiliev, S. A. Zibrov, and V. L. Velichansky, *Phys. Rev. Appl.* **20**, 034015 (2023).
51. T. Zanon, S. Guerandel, E. de Clercq, D. Holleville, N. Dimarcq, and A. Clairon, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 193002 (2005).
52. A. V. Taichenachev, V. I. Yudin, V. L. Velichansky, and S. A. Zibrov, *JETP Lett.* **82**, 449 (2005).
53. Г. А. Казаков, Б. Г. Матисов, И. Е. Мазец, Ю. В. Рождественский, *ЖТФ* **77**, 20 (2006).
54. X. L. Sun, J. W. Zhang, P. F. Cheng, C. Xu, L. Zhao, and L. J. Wang, *Opt. Express* **24**, 4532 (2016).

ЭВОЛЮЦИЯ СВОЙСТВ ОПЕРАТОРОВ ФАЗЫ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ В МОДЕЛЯХ РАБИ И ДЖЕЙНСА – КАММИНГСА

А. В. Козловский*

Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук
119234, Москва, Россия

Поступила в редакцию 23 ноября 2023 г.,
после переработки 21 декабря 2023 г.
Принята к публикации 26 декабря 2023 г.

Исследована эволюция во времени средних значений и дисперсий тригонометрических функций оператора фазы квантового электромагнитного поля, взаимодействующего с двухуровневым атомом. Рассмотрено поле с малым числом фотонов для различных начальных квантовых состояний поля и атома в рамках теории эрмитова оператора фазы Пегга – Барнетта. Исследовано различие эволюции операторов фазы, следующей из теории Джейнса – Каммингса и модели Раби в условиях ультрасильной связи атома с полем. Показано качественное отличие результатов приближенной модели Джейнса – Каммингса от результатов модели Раби в случае ультрасильной связи атома с полем для микроскопических полей с числом фотонов $\langle n \rangle \sim 1$ для фоковских и когерентных начальных квантовых состояний поля и любых начальных состояний атома. Показано, что в случае когерентного начального состояния поля с большими $\langle n \rangle > 10$ в условиях ультрасильной связи для эволюции средних и дисперсий операторов фазы поля характерен ярко выраженный квантовый эффект коллапса и возрождения средних и дисперсий этих величин.

DOI: 10.31857/S004445102405002X

1. ВВЕДЕНИЕ

Основным фундаментальным физическим процессом, исследуемым в области квантовой оптики, является динамика взаимодействия атома/молекулы с квантовомеханическим электромагнитным полем. При исследованиях таких процессов важными изучаемыми (рассчитываемыми или измеряемыми) физическими величинами являются средние квантовомеханические значения населенностей квантовых состояний атома (уровней энергии) и их флуктуации (дисперсии), а также средние значения и флуктуации разностей населенностей рассматриваемых состояний атома или молекулы. Другими фундаментальными величинами, характеризующими систему атомов и электромагнитных полей, являются средние значения амплитуды поля и их квантовые флуктуации. Величина комплекснозначной амплитуды поля (средние квантовомеханические значения неэрмитовых операторов

рождения/уничтожения электромагнитного поля) описывается в квантовой теории света с помощью эрмитовых операторов числа фотонов, а также с помощью эрмитовых операторов фазы тригонометрических функций операторов фазы (ТФОФ) электромагнитного поля, обладающих действительными средними значениями и являющихся, таким образом, непосредственно измеряемыми наблюдаемыми величинами.

Эволюция (изменение во времени) квантовомеханического вектора состояния системы атом + поле $|\Psi(t)\rangle$ может быть найдена для любого начального состояния системы $|\Psi(t=0)\rangle$ путем решения уравнения Шредингера в модели Раби. Модель Раби в дипольном приближении для двухуровневого атома учитывает как реальные переходы атома с излучением или поглощением фотонов поля, так и виртуальные процессы, означающие излучение фотона, сопровождающееся возбуждением атома, а также поглощение фотона, сопровождаемое переходом атома в нижнее энергетическое состояние [1–4]. Широко используемой приближенной теорией, основанной на модели Раби (МР), является модель Джейнса – Каммингса (МДК), в рам-

* E-mail: kozlovskiyav@lebedev.ru

ках которой в гамильтониане взаимодействия атома с полем пренебрегается членами, ответственными за виртуальные процессы. Модель Джейнса – Каммингса (приближение вращающейся волны (RWA)) положена в основу квантовой теории лазера. Как показали расчеты [5–17], применимость МДК ограничивается случаем малости величины константы взаимодействия атома с полем по сравнению с частотой поля. Предсказания МДК и МР для средних и дисперсий числа фотонов и населенностей атомных уровней совпадают между собой лишь в случае, когда абсолютная величина константы взаимодействия $|g| < 10^{-2}\omega_f$, где ω_f — частота поля.

В настоящее время в ряде экспериментальных работ [1–4] показана возможность создания «искусственного двухуровневого атома», обладающего величиной константы взаимодействия атома с полем $\tilde{g} \equiv |g|/\omega_f \sim 1$, т.е. значениями, характерными для ультрасильной связи (УСС) атома с полем. В таких условиях, как показано в теоретических работах [5–17], МДК для динамики среднего числа фотонов и населенностей состояний атома перестает быть справедливой.

В данной работе нами проведены исследования эволюции средних квантовомеханических величин для ТФОФ в условиях УСС и проведено сравнение эволюции средних величин и квантовых флуктуаций этих операторов для различных начальных квантовых состояний электромагнитного поля и двухуровневого атома для МР и МДК.

Рассмотрен случай микроскопических полей с малым числом фотонов, т.е. полей, используемых в настоящее время в экспериментах, связанных с квантовой информацией и квантовым компьютером.

2. ОПЕРАТОРЫ ФАЗЫ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ В ПРОИЗВОЛЬНОМ КВАНТОВОМ СОСТОЯНИИ

В работах [18, 19] Пеггом и Барнеттом рассмотрено решение уравнений на собственные функции фазовой переменной в дискретном спектре собственных значений фазы. Расчеты показали, что собственные векторы $|\theta_m\rangle$ операторов фазы поля, рассматриваемые в конечномерном базисе фоковских состояний, для собственных значений фазы

$$\theta_m = \theta_0 + \frac{2\pi m}{S+1}, \quad m = 0, 1, \dots, S, \quad (1)$$

где $S+1$ — неограниченно большая, но конечная размерность базиса фоковских состояний, θ_0 — произвольное число, определяющее интервал изменения

собственных значений фазы ($\theta_0 \leq \theta_m \leq \theta_0 + 2\pi$), составляют полный ортонормированный базис векторов состояний. В работах [18–20] предложено рассматривать дискретный базис собственных векторов состояний фазы в $(S+1)$ -мерном подпространстве фоковских состояний для собственных значений (5) в виде

$$|\theta_m\rangle = \frac{1}{\sqrt{S+1}} \sum_{n=0}^S e^{in\theta_m} |n\rangle. \quad (2)$$

Эрмитов оператор фазы $\hat{\varphi}_\theta$ с собственными значениями θ_m при этом определяется согласно

$$\hat{\varphi}_\theta = \sum_{m=0}^S \theta_m |\theta_m\rangle \langle \theta_m|, \quad \hat{\varphi}_\theta |\theta_m\rangle = \theta_m |\theta_m\rangle. \quad (3)$$

Важной особенностью оператора фазы $\hat{\varphi}_\theta$, определяемого согласно (1)–(3), является то, что результаты расчетов средних значений и дисперсий фазы поля качественно зависят от выбора параметра θ_0 . За исключением фоковских $|n\rangle$ и собственных состояний поля оператора фазы $|\theta_m\rangle$, для которых средние и дисперсии не зависят от θ_0 , только правильный выбор значения параметра θ_0 обеспечивает получение физически осмысленных результатов при расчете этих средних величин. Таким образом, в данной теории вид оператора фазы поля зависит от рассматриваемого квантового состояния поля. В то же время, как показано в [18–21], ТФОФ поля (3) имеют вид

$$\cos \hat{\varphi}_\theta = \frac{e^{i\hat{\varphi}_\theta} + e^{-i\hat{\varphi}_\theta}}{2}, \quad \sin \hat{\varphi}_\theta = \frac{e^{i\hat{\varphi}_\theta} - e^{-i\hat{\varphi}_\theta}}{2i}$$

и могут быть записаны с помощью соотношений

$$\begin{aligned} e^{i\hat{\varphi}_\theta} &= \sum_{n=1}^S |n-1\rangle \langle n| + e^{i(S+1)\theta_0} |S\rangle \langle 0|, \\ e^{-i\hat{\varphi}_\theta} &= \sum_{n=1}^S |n\rangle \langle n-1| + e^{-i(S+1)\theta_0} |0\rangle \langle S|, \end{aligned} \quad (4)$$

при этом средние значения ТФОФ $\cos \hat{\varphi}_\theta$ и $\sin \hat{\varphi}_\theta$ не зависят от параметра θ_0 и, следовательно, не зависят от рассматриваемого конкретного квантового состояния поля. Также не зависят от θ_0 и дисперсии эрмитовых ТФОФ поля.

3. МОДЕЛИ РАБИ И ДЖЕЙНСА – КАММИНГСА ДИПОЛЬНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДВУХУРОВНЕВОГО АТОМА С ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМ ПОЛЕМ

Рассмотрим операторы рождения (уничтожения) $\hat{a}^\dagger(\hat{a})$ электромагнитного поля, удовлетворяющие следующим коммутационным соотношениям:

$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$, и оператор числа фотонов, который определяется с помощью таких операторов согласно $\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$.

В случае дипольного взаимодействия атома с полем гамильтониан такой системы в квантовой теории может быть записан в виде (гамильтониан МР для двухуровневого атома, взаимодействующего с одномодовым электромагнитным полем)

$$\hat{H} = \hbar\omega_f \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{\hat{\sigma}^z}{2} \hbar\omega_a + \hbar\hat{V}, \quad (5)$$

где оператор дипольного взаимодействия атома с полем есть

$$\begin{aligned} \hat{V} &= (g\hat{a}^\dagger + g^*\hat{a})(\hat{\sigma}_+ + \hat{\sigma}_-) = \\ &= g\hat{a}\hat{\sigma}_+ + \hat{a}^\dagger\hat{\sigma}_-g^* + g\hat{a}^\dagger\hat{\sigma}_+ + \hat{a}\hat{\sigma}_-g^*, \end{aligned} \quad (6)$$

для операторов атомной подсистемы

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}^z &= |e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|, \\ \hat{\sigma}_+ &= |e\rangle\langle g|, \quad \hat{\sigma}_- = |g\rangle\langle e| \end{aligned}$$

и константы дипольного взаимодействия поля с атомом

$$g = \sqrt{\frac{\omega_f}{2\hbar\epsilon_0 V}} d. \quad (7)$$

Здесь $d \equiv \langle g|\hat{d}|e\rangle = |d_{eg}|e^{i\varphi_d}$ — матричный элемент дипольного перехода атома, в общем случае являющийся комплексным числом; V — объем квантования электромагнитного поля, ω_f — частота поля.

В представлении взаимодействия гамильтониан взаимодействия атома с полем приобретает вид

$$\begin{aligned} \hat{V}_I &= |g|(\hat{a}\hat{\sigma}_+e^{-i\Delta_-t} + \hat{a}^\dagger\hat{\sigma}_-e^{i\Delta_-t} + \\ &+ \hat{a}^\dagger\hat{\sigma}_+e^{i\Delta_+t} + \hat{a}\hat{\sigma}_-e^{-i\Delta_+t}), \end{aligned} \quad (8)$$

а уравнение Шредингера для вектора состояния системы атом + поле может быть записано в представлении взаимодействия следующим образом:

$$i\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = \hat{V}_I|\Psi(t)\rangle. \quad (9)$$

Будем решать уравнение движения (9), используя следующее разложение вектора состояния системы по полному базису фоковских состояний поля $|n\rangle$ и базису квантовых состояний атома; возбужденному $|e\rangle$ и нижнему $|g\rangle$ энергетическим состояниям двухуровневого атома:

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} [C_{e,n}(t)|e, n\rangle + C_{g,n}(t)|g, n\rangle], \\ C_{g,0}(t) &= 0. \end{aligned} \quad (10)$$

Уравнения для амплитуд вероятности, входящих

в (10), имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{dC_{e,n}(t)}{dt} &= -i|g|[\sqrt{n+1}e^{i\Delta_-t-i\varphi_d}C_{g,n+1}(t) + \\ &+ \sqrt{n}e^{i\Delta_+t+i\varphi_d}C_{g,n-1}(t)], \\ \frac{dC_{g,n}(t)}{dt} &= -i|g|[\sqrt{n+1}e^{-i\Delta_-t+i\varphi_d}C_{e,n+1}(t) + \\ &+ \sqrt{n}e^{-i\Delta_+t-i\varphi_d}C_{e,n-1}(t)], \end{aligned} \quad (11)$$

где обозначено $\Delta_- \equiv \omega_a - \omega_f$, $\Delta_+ \equiv \omega_f + \omega_a$, $g = |g|e^{i\varphi_d}$.

Введем безразмерные параметры

$$\tilde{\Delta}_- \equiv \frac{\omega_a - \omega_f}{|g|}, \quad \tilde{\Delta}_+ \equiv \frac{\omega_f + \omega_a}{|g|},$$

а также

$$\begin{aligned} \Omega_n &\equiv \sqrt{\tilde{\Delta}_-^2 + 4(n+1)}, \quad \Omega_{n-1} \equiv \sqrt{\tilde{\Delta}_-^2 + 4n}, \\ t_g &\equiv |g|t. \end{aligned}$$

Предположим далее, что частота поля в общем случае не совпадает с частотой перехода атома и константа g взаимодействия поля с атомом является комплексным числом, а в гамильтониане взаимодействия атома с полем (8) два последних слагаемых, ответственных за виртуальные переходы, равны нулю (приближение вращающейся волны). Тогда уравнение Шредингера для атома в поле может быть решено аналитически. Точное аналитическое решение системы уравнений в приближении вращающейся волны МДК (коэффициенты разложения по фоковским состояниям $C_{e,n}(t)$ и $C_{g,n}(t)$) может быть записано в виде [22]

$$\begin{aligned} C_{e,n}(t_g) &= C_{e,n}(0)A_n(t_g) - C_{g,n+1}(0)B_n(t_g), \\ C_{g,n}(t_g) &= C_{g,n}(0)A_{n-1}^*(t_g) + C_{e,n-1}(0)B_{n-1}^*(t_g), \end{aligned} \quad (12)$$

где обозначено

$$\begin{aligned} A_n(t_g) &\equiv \left[\cos \frac{\Omega_n t_g}{2} - \frac{i\tilde{\Delta}_-}{\Omega_n} \sin \frac{\Omega_n t_g}{2} \right] e^{i\tilde{\Delta}_- t_g/2}, \\ B_n(t_g) &\equiv 2i \frac{\sqrt{n+1}}{\Omega_n} \sin \frac{\Omega_n t_g}{2} e^{i\varphi_d} e^{i\tilde{\Delta}_- t_g/2}. \end{aligned} \quad (13)$$

4. ДИНАМИКА КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКИХ СРЕДНИХ И ФЛУКТУАЦИЙ ТРИГОНОМЕТРИЧЕСКИХ ОПЕРАТОРОВ ФАЗЫ ПОЛЯ

Согласно теории эрмитова оператора фазы поля $\hat{\varphi}$ [18–21] (нижний индекс θ в обозначении оператора фазы в дальнейшем в записи будет опускаться) средние квантовомеханические значения ТФОФ

поля для любого квантового состояния поля $|\Psi(t)\rangle$ имеют вид

$$\begin{aligned}\langle \cos \hat{\varphi}(t) \rangle &= \langle \Psi(t) | \cos \hat{\varphi} | \Psi(t) \rangle = \\ &= \operatorname{Re} \sum_{n=0}^{\infty} [C_{e,n}^*(t) C_{e,n+1}(t) + \\ &\quad + C_{g,n}^*(t) C_{g,n+1}(t)], \\ \langle \sin \hat{\varphi}(t) \rangle &= \langle \Psi(t) | \sin \hat{\varphi} | \Psi(t) \rangle = \\ &= \operatorname{Im} \sum_{n=0}^{\infty} [C_{e,n}^*(t) C_{e,n+1}(t) + \\ &\quad + C_{g,n}^*(t) C_{g,n+1}(t)].\end{aligned}\quad (14)$$

Для средних квадрата ТФОФ, необходимых для расчета дисперсий (флуктуаций) этих величин, для произвольных состояний поля и атома $|\Psi(t)\rangle$ находим

$$\begin{aligned}\langle (\cos \hat{\varphi})^2(t) \rangle &= \langle \Psi(t) | \cos^2 \hat{\varphi} | \Psi(t) \rangle = \\ &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \operatorname{Re} \sum_{n=0}^{\infty} [C_{e,n}^*(t) C_{e,n+2}(t) + \\ &\quad + C_{g,n}^*(t) C_{g,n+2}(t)], \\ \langle (\sin \hat{\varphi})^2(t) \rangle &= \langle \Psi(t) | \sin^2 \hat{\varphi} | \Psi(t) \rangle = \\ &= \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \operatorname{Re} \sum_{n=0}^{\infty} [C_{e,n}^*(t) C_{e,n+2}(t) + \\ &\quad + C_{g,n}^*(t) C_{g,n+2}(t)].\end{aligned}\quad (15)$$

Использование соотношений (15) позволяет найти выражения для дисперсий (флуктуаций) ТФОФ $\langle (\Delta \cos \hat{\varphi})^2(t) \rangle \equiv \langle (\cos \hat{\varphi})^2(t) \rangle - \langle \cos \hat{\varphi}(t) \rangle^2$ и $\langle (\Delta \sin \hat{\varphi})^2(t) \rangle \equiv \langle (\sin \hat{\varphi})^2(t) \rangle - \langle \sin \hat{\varphi}(t) \rangle^2$ путем численного решения системы связанных дифференциальных уравнений (11) в рамках МР.

5. ФОКОВСКОЕ НАЧАЛЬНОЕ СОСТОЯНИЕ ПОЛЯ

Рассмотрим случай, когда исходное поле при $t = 0$ находится в чистом фоковском состоянии $|n_0\rangle$. При этом в общем случае начальные значения коэффициентов разложения вектора состояния системы отличны от нуля $C_{s,n_0}(0) \neq 0$ для $s = e, g$, а все остальные $C_{s,n_0}(0) = 0, n \neq n_0$.

В этом случае решение МДК (12), (13), использующей приближение RWA, приобретает следующий вид:

$$\begin{aligned}C_{e,n_0}(t_g) &= C_{e,n_0}(0) A_{n_0}(t_g), \\ C_{e,n_0-1}(t_g) &= -C_{g,n_0}(0) B_{n_0-1}(t_g), \\ C_{g,n_0}(t_g) &= C_{g,n_0}(0) A_{n_0-1}^*(t_g), \\ C_{g,n_0+1}(t_g) &= C_{e,n_0}(0) B_{n_0}^*(t_g).\end{aligned}\quad (16)$$

Остальные $C_{e,n}(t_g) = C_{g,n}(t_g) = 0$ для $n \neq n_0, n_0 - 1$ или $n \neq n_0, n_0 + 1$ соответственно.

Для безразмерного времени в (16) использовано обозначение $t_g \equiv |g|t$.

Если начальное состояние атома $|e\rangle$, то ненулевыми коэффициентами разложения вектора состояния системы являются

$$\begin{aligned}C_{e,n_0}(t_g) &= C_{e,n_0}(0) A_{n_0}(t_g), \\ C_{g,n_0+1}(t_g) &= C_{e,n_0}(0) B_{n_0}^*(t_g).\end{aligned}\quad (17)$$

Если же начальное состояние атома $|g\rangle$, то ненулевыми являются зависимости от времени

$$\begin{aligned}C_{e,n_0-1}(t_g) &= -C_{g,n_0}(0) B_{n_0-1}(t_g), \\ C_{g,n_0}(t_g) &= C_{g,n_0}(0) A_{n_0-1}^*(t_g).\end{aligned}\quad (18)$$

Используя формулы (16)–(18) и (14), нетрудно убедиться, что в случае начального фоковского состояния поля для исходных состояний атома $|e\rangle$ и $|g\rangle$ квантовомеханические средние ТФОФ (14) равны нулю: $\langle \cos(\hat{\varphi}(t)) \rangle_{n,RWA} = \langle \sin(\hat{\varphi}(t)) \rangle_{n,RWA} = 0$, что соответствует равномерному распределению случайных значений фазы поля от 0 до 2π для любого момента времени. Аналогично получаем из (16)–(18) и (15), что дисперсии $\langle (\Delta \cos \hat{\varphi})^2(t) \rangle_{n,RWA} = \langle (\Delta \sin \hat{\varphi})^2(t) \rangle_{n,RWA} = 1/2$ и не меняются во времени для фоковских начальных состояний поля и для начальных состояний атома $|e\rangle$ или $|g\rangle$.

На рис. 1а,б показаны зависимости от времени дисперсии $\langle (\Delta \cos \hat{\varphi})^2(t) \rangle_{n,RWA}$ и $\langle (\Delta \cos(\hat{\varphi}(t)))^2 \rangle_{n,MR}$ (т.е. для МДК и МР соответственно) в условиях УСС для начального состояния $|g\rangle$ и $|e\rangle$ атома и начального состояния поля $|1\rangle$. На рисунке видно, что результаты двух моделей противоречат друг другу. МДК предсказывает, что дисперсии ТФОФ поля не изменяются во времени при взаимодействии атома с полем, тогда как МР указывает в условиях УСС на сложную зависимость от времени этих величин. Из рисунков также следует (ср. рис. 1а и рис. 1б), что характер эволюции дисперсий во времени качественно зависит от начального состояния атома.

Расчеты показывают также, что средние значения ТФОФ совпадают в таких условиях между собой для обеих моделей и равны нулю для любого момента времени.

Результаты расчетов не зависят от значения фазы матричного элемента перехода φ_d .

Качественно иная зависимость от времени средних и дисперсий операторов фазы поля характерна для случая начального состояния суперпозиции

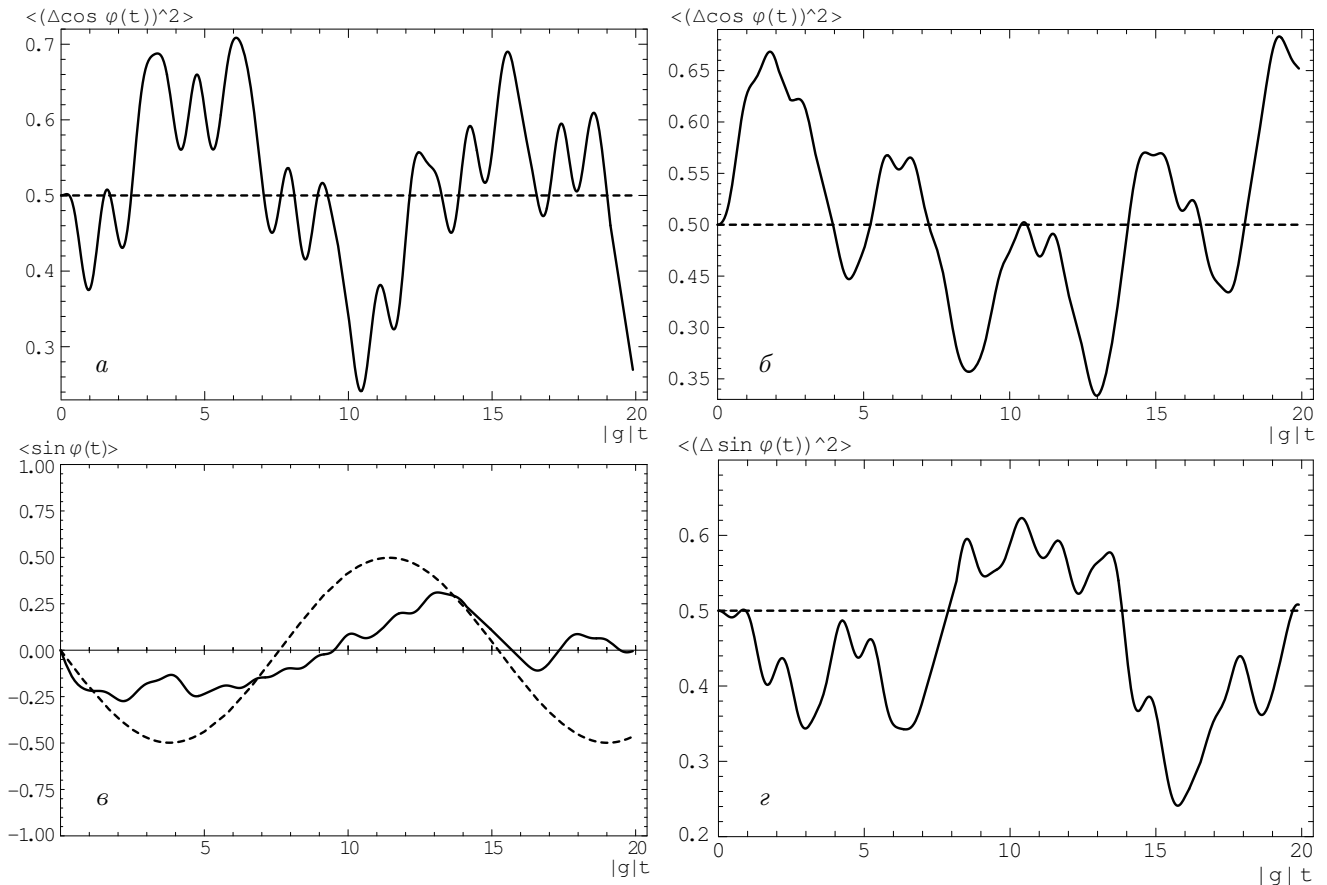


Рис. 1. *а* — Зависимость от времени дисперсии оператора косинуса фазы поля $\langle (\Delta \cos \hat{\varphi})^2 \rangle$, следующая из модели Раби для системы атом + поле в начальном фоковском состоянии поля ($|1\rangle$) и невозбужденном состоянии атома $|g\rangle$, для значения безразмерной константы связи $g/\omega_f = 0.5$. Значение фазового угла матричного элемента перехода $\varphi_d = 0$. Штриховой линией показана аналогичная зависимость, полученная в рамках модели Джейнса–Каммингса. *б* — Зависимость от времени дисперсии оператора косинуса фазы поля $\langle (\Delta \cos \hat{\varphi})^2 \rangle$ для системы атом + поле в начальном фоковском состоянии поля ($|1\rangle$) и возбужденном состоянии атома $|e\rangle$ для тех же значений параметров. *в* — Зависимость от времени среднего значения оператора синуса фазы поля теории Перга–Барнетта $\langle \sin \hat{\varphi} \rangle$, следующая из модели Раби для системы атом + поле в начальном фоковском состоянии поля ($|n = 1\rangle$) и состоянии суперпозиции атома $\frac{1}{\sqrt{2}}(|e\rangle + |g\rangle)$ для значения безразмерной константы связи $g/\omega_f = 0.5$. Значение фазового угла матричного элемента перехода $\varphi_d = 0$. Штриховой линией показана аналогичная зависимость, полученная в рамках модели Джейнса–Каммингса. *г* — Зависимость от времени дисперсии оператора синуса фазы поля $\langle (\Delta \sin \hat{\varphi})^2 \rangle$ для системы атом + поле в начальном состоянии поля ($|n = 1\rangle$) и состоянии суперпозиции атома для значения фазового угла матричного элемента перехода $\varphi_d = \pi/2$ для тех же значений остальных параметров. Штриховой линией показана аналогичная зависимость, полученная в рамках модели Джейнса–Каммингса

возбужденного и нижнего энергетических состояний атома:

$$|\psi_a(t=0)\rangle = C_e|e\rangle + C_g|g\rangle. \quad (19)$$

На рис. 1в,г показаны примеры зависимостей средних значений оператора синуса фазы поля для начального состояния суперпозиции атома и УСС. Как видно на рис. 1в, среднее оператора синуса фазы отлично от нуля как для МДК, так и для МР и обладает сложной зависимостью этой величины от времени в МР в режиме УСС. Эти зависимости качественно отличаются друг от друга для двух моделей. МДК предсказывает регулярное изменение средних

операторов фазы во времени, подобное осцилляциям Раби.

Как показано на рис. 1г, дисперсии (флуктуации) оператора синуса изменяются во времени в рамках МР и с высокой точностью остаются неизменными в теории МДК в рассмотренном случае начального условия суперпозиции атомных состояний и фоковского состояния поля. В данном случае среднее оператора синуса близко к нулю для любого момента времени. Изменение значения фазового угла матричного элемента перехода между состояниями атома φ_d приводит к резкому увеличению в рамках МДК амплитуд осцилляций во времени средне-

го значения оператора синуса фазы и его дисперсии (флуктуаций) и значительному их отличию от 0 и $1/2$ соответственно.

Отметим, что на интервале изменения нормированного безразмерного времени $\Delta(|g|t) > 1000$ рассматриваемые средние и дисперсии принимают хаотический вид в интервалах изменения этих величин.

6. КОГЕРЕНТНОЕ НАЧАЛЬНОЕ СОСТОЯНИЕ ПОЛЯ

Рассмотрим в качестве квантового состояния измеряемого поля когерентное состояние

$$|\alpha\rangle = e^{-n_\alpha/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \quad \alpha = \sqrt{n_\alpha} e^{i\varphi_\alpha}, \quad n_\alpha \equiv |\alpha|^2.$$

Как видно на рис. 2а, изменение во времени среднего значения $\langle \cos(\hat{\varphi}(t)) \rangle_{\alpha, NRWA}$, рассчитанного в рамках МР (NRWA) для начального когерентного состояния поля $|\alpha\rangle$ и возбужденного состояния атома $|e\rangle$, обладает сложной нерегулярной зависимостью от времени и не имеет характера стандартных регулярных осцилляций Раби. На рис. 2а динамика среднего значения оператора фазы поля сравнивается с аналогичной зависимостью $\langle \cos(\hat{\varphi}(t)) \rangle_{\alpha, RWA}$, полученной с использованием приближения RWA. На рисунке видно, что в рассматриваемом нами случае ультрасильной связи МР дает качественно отличную зависимость от времени средних оператора фазы поля на всем интервале времени за исключением пренебрежимо малых значений $|g|t$. На рис. 2б показаны зависимости дисперсий $\langle (\Delta \cos(\hat{\varphi}(t)))^2 \rangle_{\alpha, NRWA}$ и $\langle (\Delta \cos(\hat{\varphi}(t)))^2 \rangle_{\alpha, RWA}$, полученные в рамках МР и МДК соответственно, для тех же значений параметров. Расчеты показывают, что так же, как и в случае квантовых средних значений ТФОФ поля, в условиях УСС результаты двух моделей качественно различны. Приближение RWA, имеющее место в теории Джейнса–Каммингса, для случая УСС атома с полем, оказывается несправедливо.

Наши расчеты показали, что абсолютные значения средних и дисперсий ТФОФ поля качественно зависят от начального значения фазового угла начального когерентного состояния поля φ_α (см. рис. 2 и рис. 3 для сравнения). Таким образом, сам характер эволюции средних значений и дисперсий ТФОФ поля во времени зависит от начального значения фазового угла когерентного состояния поля.

В то же время, как показали наши расчеты, динамика средних и дисперсий фазы поля для начальных состояний атома $|g\rangle$ или $|e\rangle$ не зависит от значения фазового угла матричного элемента перехода

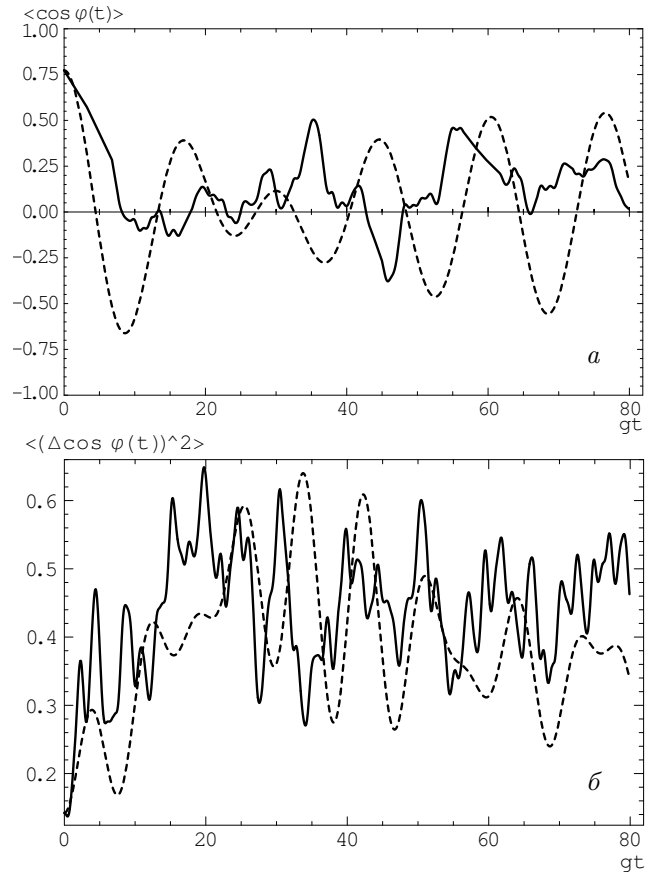


Рис. 2. а — Зависимости от времени среднего значения оператора косинуса фазы поля теории Пегга–Барнетта $\langle \cos \hat{\varphi} \rangle$, следующая из модели Раби для системы атом + поле в начальном когерентном состоянии поля ($|\alpha| = 1$) и возбужденном состоянии атома $|e\rangle$, для значения безразмерной константы связи $g/\omega_f = 0.7$, $\omega_A = 1.1\omega_f$. Значение фазового угла матричного элемента перехода $\varphi_d = 0$. Штриховой линией показана аналогичная зависимость, полученная в рамках модели Джейнса–Каммингса. б — Зависимости от времени дисперсии оператора косинуса фазы поля $\langle (\Delta \cos \hat{\varphi})^2 \rangle$ для системы атом + поле в начальном когерентном состоянии поля ($|\alpha| = 1$) и возбужденном состоянии атома $|e\rangle$ для тех же значений параметров

да φ_d . Качественная зависимость от этого параметра возникает в случае начального состояния атома суперпозиции вида (19). На рис. 4 представлены зависимости от времени среднего и дисперсии оператора косинуса фазы для $\varphi_d = \pi/2$ в случае начального состояния суперпозиции атома $\frac{1}{\sqrt{2}}(|e\rangle + |g\rangle)$ и когерентного состояния поля. Расчеты показали, что для $\varphi_d = 0$ и тех же значений параметров системы динамика рассматриваемых средних и дисперсий качественно отличается от динамики в случае $\varphi_d = \pi/2$ в условиях УСС.

При увеличении числа фотонов начального когерентного состояния n_α различие между результа-

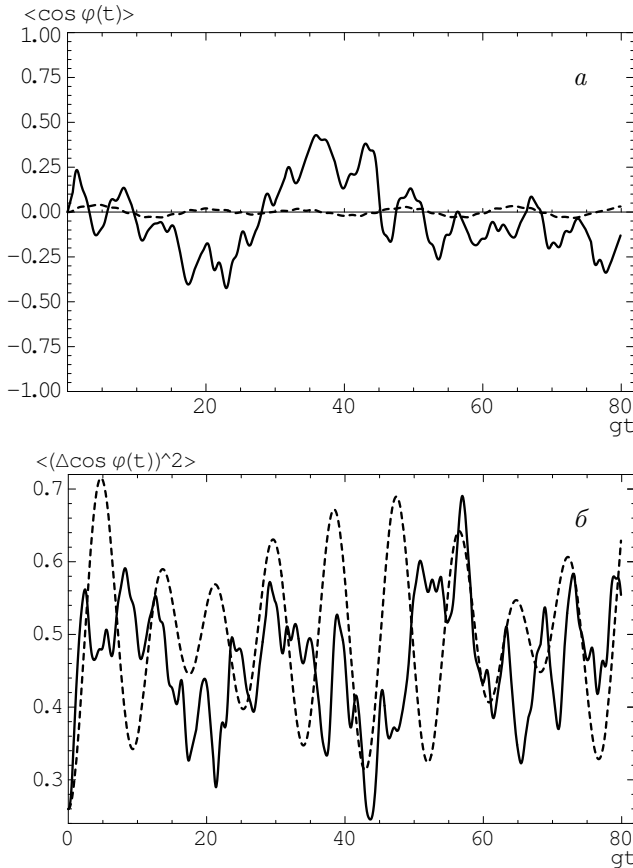


Рис. 3. *а* — Зависимости от времени среднего значения оператора косинуса фазы поля теории Пеппа–Барнетта $\langle \cos \hat{\varphi} \rangle$, следующая из модели Раби (NRWA) для системы атом + поле в начальном когерентном состоянии поля ($|\alpha = e^{i\pi/2}\rangle$) и возбужденном состоянии атома $|e\rangle$, для значения безразмерной константы связи $g/\omega_f = 0.7$, $\omega_A = 1.1\omega_f$. Значение фазового угла матричного элемента перехода $\varphi_d = 0$. Штриховой линией показана аналогичная зависимость, полученная в рамках модели Джейнса–Каммингса (RWA). *б* — Зависимости от времени дисперсии оператора косинуса фазы поля $\langle (\Delta \cos \hat{\varphi})^2 \rangle$ для системы атом + поле в начальном когерентном состоянии поля ($|\alpha = e^{i\pi/2}\rangle$) и возбужденном состоянии атома $|e\rangle$ для тех же значений параметров

тами теорий МДК и МР для эволюции поля уменьшается как для средних значений, так и для дисперсий тригонометрических операторов фазы и для мезоскопических когерентных состояний с $n_\alpha \gg 1$ практически совпадают для УСС.

При этом в случае когерентного начального состояния поля при $n_\alpha \gg 1$ и состояния атома суперпозиции (19) присутствует ярко выраженное явление коллапса и возрождения как для средних значений, так и для дисперсий ТФОФ поля. Так, при $n_\alpha = 30$ ($|\tilde{g}| = 0.1$, $\tilde{\Delta}_- = 1$) и в интервале изменения безразмерного времени $700 < |g|t < 1100$ для сред-

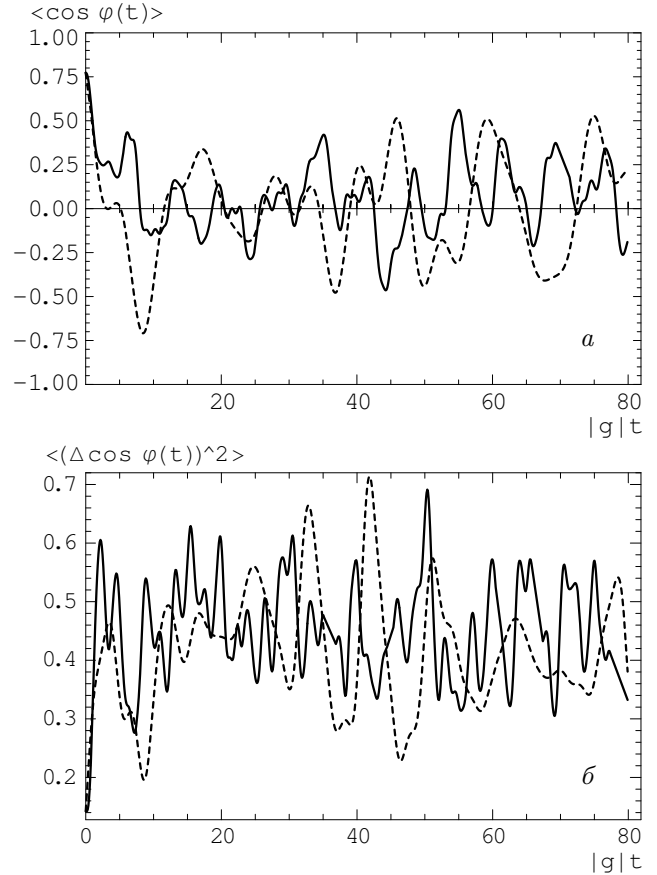


Рис. 4. *а* — Зависимости от времени среднего значения оператора косинуса фазы поля теории Пеппа–Барнетта $\langle \cos \hat{\varphi} \rangle$, следующая из модели Раби (NRWA) для системы атом + поле в начальном когерентном состоянии поля ($|\alpha = 1\rangle$) и суперпозиционном состоянии атома $\frac{1}{\sqrt{2}}(|e\rangle + |g\rangle)$, для значения безразмерной константы связи $g/\omega_f = 0.7$, $\omega_A = 1.1\omega_f$. Значение фазового угла матричного элемента перехода $\varphi_d = \pi/2$. Штриховой линией показана аналогичная зависимость, полученная в рамках модели Джейнса–Каммингса (RWA). *б* — Зависимости от времени дисперсии оператора косинуса фазы поля $\langle (\Delta \cos \hat{\varphi})^2 \rangle$ для системы атом + поле в начальном когерентном состоянии поля ($|\alpha = 1\rangle$) и суперпозиционном состоянии атома $\frac{1}{\sqrt{2}}(|e\rangle + |g\rangle)$ для тех же значений параметров

них значений операторов имеют место соотношения

$$\begin{aligned} \langle \cos(\hat{\varphi}(t)) \rangle_{n,RWA/NRWA}, \langle \sin(\hat{\varphi}(t)) \rangle_{n,RWA/NRWA} &\approx 0, \\ \langle (\Delta \cos(\hat{\varphi}(t)))^2 \rangle_{n,NRWA}, \langle (\Delta \cos(\hat{\varphi}(t)))^2 \rangle_{n,RWA} &\approx \frac{1}{2} \end{aligned}$$

(то же для операторов $\sin$). При $|g|t < 700$ имеют место затухающие регулярные осцилляции Раби. С ростом времени взаимодействия $|g|t > 1100$ осцилляции Раби указанных величин восстанавливаются, т. е. явление коллапса сменяется эффектом возрождения осцилляций Раби [14,17,22–27]. При $|g|t < 700$

имеют место затухающие осцилляции как средних, так и дисперсий. Следует отметить, что значения средних и дисперсий ТФОФ поля в интервале изменения времени, для которого присутствует квантовый эффект коллапса, характерны для фоковского состояния поля.

Эффект коллапса и возрождения осцилляций рассмотренных величин имеет место для любых начальных состояний атома.

Частота временных осцилляций рассмотренных величин значительно отличается от доминантной частоты осцилляций Раби $\Omega_R = \sqrt{\Delta^2 + 4g^2(n_\alpha + 1)}$, $\Delta \equiv \omega_a - \omega_f$, характерной для осцилляций Раби инверсии населенности атома для начального когерентного состояния поля [14, 17, 27].

Из сказанного выше также можно сделать вывод, что для исследования эволюции средних значений и дисперсий ТФОФ поля в рамках теории оператора фазы Пегга–Барнетта применимо как приближение МДК (RWA), так и МР (NRWA) для мезо- и макрополей с большим числом фотонов в условиях УСС.

Для малого числа фотонов когерентного состояния поля $n_\alpha \sim 1$ при УСС характер эволюции средних значений и дисперсий ТФОФ поля качественно зависит от фазового угла когерентного начального состояния поля φ_α для любого начального состояния атома, при этом регулярные осцилляции Раби и эффект коллапса и возрождения отсутствуют.

Зависимость динамики изменения указанных величин от фазового угла дипольного момента перехода атома φ_d имеет место только в случае начального состояния атома (19) для малых значений $n_\alpha \sim 1$ (см. рис. 4), в то же время при больших $n_\alpha > 10$ эволюция средних значений и дисперсий ТФОФ поля практически не зависит от φ_d для любых начальных состояний атома. Следует отметить, что эволюция средних и дисперсий операторов фазы слабо зависит от начального состояния атома в случае больших чисел фотонов $n_\alpha > 10$ начального когерентного состояния поля.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе нами проведено исследование эволюции во времени средних квантовомеханических значений (наблюдаемых) и дисперсий (квантовых флуктуаций) ТФОФ поля при взаимодействии поля с атомом. Рассмотрен и проанализирован случай УСС атома и поля. Для расчетов использована квантовомеханическая модель Раби и теория эрмита оператора фазы электромагнитного поля Пег-

га–Барнетта. Рассмотрен случай квантовых микрополей со средним числом фотонов ~ 1 . Проведено сравнение характера эволюции указанных величин, следующего из теории Раби и приближенной теории Джейнса–Каммингса, использующей приближение вращающейся волны в условиях УСС.

Анализ проведен для различных начальных квантовых состояний поля и двухуровневого атома.

Если электромагнитное поле в начальный момент времени находится в фоковском состоянии, результаты МР принципиально отличаются от результатов расчета эволюции средних и/или дисперсий ТФОФ поля в условиях УСС. Нами показано, что в случае начального состояния атома в возбужденном или нижнем энергетическом состоянии дисперсии операторов фазы в рамках МДК остаются неизменными во времени, тогда как МР предсказывает сложную зависимость от времени дисперсий ТФОФ поля. При начальном состоянии суперпозиции двух состояний атома качественное отличие результатов МР и МДК присутствует как для средних значений, так и для дисперсий операторов. В этом случае имеет место качественная зависимость характера эволюции средних и флуктуаций ТФОФ поля от фазового угла матричного элемента дипольного перехода между состояниями атома.

Нами показана неприменимость МДК (приближения вращающейся волны, RWA) для расчета эволюции операторов фазы в условиях УСС для фоковских начальных состояний поля.

Если начальное состояние поля является когерентным $|\alpha\rangle$ с малым числом фотонов $n_\alpha \sim 1$, то приближение RWA (МДК) оказывается неприменимым для расчета динамики средних и дисперсий ТФОФ поля в условиях УСС для любого начального состояния атома, взаимодействующего с полем. С ростом n_α различие результатов МР и МДК сокращается и при $n_\alpha \gg 10$ результаты обеих моделей почти не различаются между собой для любых начальных состояний атома в условиях УСС.

В данной работе показано, что эволюция рассматриваемых величин качественно зависит от фазового угла начального когерентного состояния микроскопического поля φ_α для любых начальных состояний атома, а также при УСС качественно зависит от значения фазового угла φ_d матричного элемента перехода атома в случае начального состояния суперпозиции состояний атома.

Показано, что в случае начального когерентного состояния поля с числом фотонов $n_\alpha \gg 1$ и при произвольном начальном состоянии атома для эволюции во времени средних значений и дисперсий

ТФОФ поля характерно явление коллапса и возрождения осцилляций Раби этих величин.

ЛИТЕРАТУРА

1. P. Forn-Díaz, L. Lamata, E. Rico, J. Kono, and E. Solano, *Rev. Mod. Phys.* **91**, 25005 (2019).
2. T. Niemczyk, F. Deppe, H. Huebl, E. P. Menzel, F. Hocke, M. J. Schwarz, J. J. Garcia-Ripoll, D. Zueco, T. Hümmer, E. Solano, A. Marx, and R. Gross, *Nature Phys.* **6**, 772 (2010).
3. A. Le Boité, *Adv. Quantum Technol.* **37**, 1900140 (2020).
4. A. F. Kockum, A. Miranowicz, S. DeLiberato, S. Savasta, and F. Nori, *Nature Rev. Phys.* **1**, 19 (2019).
5. Shuangshuang Fu, Shunlong Luo, and Yue Zhang, *Quantum Inf. Proces.* **20**, 88 (2021).
6. Jin-Sheng Peng and Gao-xiang Li, *Phys. Rev. A* **45**, 3289 (1992).
7. I. Feranchuk, A. Ivanov, Van-Hoang Le, and A. Ulyanov, *Non-perturbative Description of Quantum Systems*, *Lecture Notes Phys.* **894**, 362 (2015).
8. F. A. Wolf, M. Kollar, and D. Braak, *Phys. Rev. A* **85**, 053817 (2012).
9. Qing-Hu Chen, Tao Liu, Yu-Yu Zhang, and Ke-Lin Wang, *EPL* **96**, 14003 (2011), www.epljournal.org, doi: 10.1209/0295-5075/96/14003.
10. Jin-sheng Peng and Gao-xiang Li, *Phys. Rev. A* **47**, 3167 (1993).
11. T. Werliang, A. V. Dodonov, E. L. Duzzioni, and C. J. Villas-Boas, *Phys. Rev. A* **78**, 053805 (2008).
12. Ho Trung Dung, R. Tanaś, and A. S. Shumovsky, *J. Mod. Opt.* **38**, 2069 (1991).
13. Ho Trung Dung, R. Tanas, and A. S. Shumovsky, *Opt. Commun.* **79**, 462 (1990).
14. H. X. Meng, C. L. Chai, and Z. M. Zhang, *Phys. Rev. A* **45**, 2131 (1992).
15. A. A. Faisal El-Orany, M. H. Mahran, M. R. B. Wahiddin, and A. M. Hashim, *Opt. Commun.* **240**, 169 (2004).
16. M. H. Naderi, *J. Phys. A: Math. Theor.* **44**, 055304 (2011).
17. Qiongtao Xie, Honghua Zhong, M. T. Batchelor, and Chaohong Lee, *J. Phys. A: Math. Theor.* **50**, 113001, (2017).
18. D. T. Pegg and S. M. Barnett, *Phys. Rev. A* **39**, 1665 (1989).
19. S. M. Barnett and D. T. Pegg, *J. Phys. A* **19**, 3849 (1986).
20. P. Carruthers and M. M. Nieto, *Rev. Mod. Phys.* **40**, 411 (1968).
21. A. V. Kozlovskii, *J. Mod. Opt.* **66**, 463 (2019).
22. В. П. Шляйх, *Квантовая оптика в фазовом пространстве*, Физматлит, Москва (2005).
23. J. H. Eberly, N. B. Narozhny, and J. J. Sanchez-Mondragon, *Phys. Rev. Lett.* **44**, 1323 (1980).
24. N. B. Narozhny, J. J. Sanchez-Mondragon, and J. H. Eberly, *Phys. Rev. A* **23**, 236 (1981).
25. H. I. Yoo, J. J. Sanchez-Mondragon, and J. H. Eberly, *J. Phys. A* **14**, 1383 (1981).
26. J. Eiselt and H. Risken, *Phys. Rev. A* **43**, 346 (1991).
27. А. В. Козловский, *КЭ* **40**, 223 (2010).

КОГЕРЕНТНЫЕ СОСТОЯНИЯ В ТЕПЛОМ КВАНТОВОМ ТРАНСПОРТЕ

Е. В. Орленко^{a}, Ф. Е. Орленко^b*

*^a Санкт-Петербургский политехнический университет им. Петра Великого
195251, Санкт-Петербург, Россия*

*^b Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна
191186, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 21 марта 2023 г.,
после переработки 18 декабря 2023 г.
Принята к публикации 20 декабря 2023 г.

Работа посвящена описанию переноса энергии когерентными тепловыми возбуждениями в диэлектриках, метаматериалах и наноразмерных системах. В технике вторичного квантования предложен общий формализм теплопроводности, учитывающий как модель свободных фононов при передаче тепла, так и образование когерентных шредингеровских состояний осцилляторной системы. Получен общий вид решения временной задачи с произвольными начальными условиями. Точное решение получено аналитически для теплового потока, переносимого когерентными фононами, созданными электронным волновым пакетом, продуцированным лазерным импульсом, воздействовавшим на наноматериал. Полученный точный вид решения в квадратурах создает основу для количественного описания когерентных фононов с различными начальными условиями, а также с учетом тепловых распределений, что позволяет проводить оценку тепловых свойств нанокристаллов. Показано, что при определенных соотношениях констант, характеризующих взаимодействие фононов с электронной подсистемой, в кристалле может устанавливаться незатухающий со временем тепловой поток.

DOI: 10.31857/S0044451024050031

1. ВВЕДЕНИЕ

Теоретические и экспериментальные исследования последних лет показали, что перенос тепловой энергии в диэлектриках и метаматериалах на нано- и микроуровне часто носит квантово-механический характер когерентности. Квантовый характер переноса энергии приводит к новым физическим эффектам, таким как фононная когерентность, тепловая сверхпроводимость [1], тепловое эхо, баллистический резонанс и др.

При классическом подходе к описанию тепловых процессов, основанном на феноменологически вводимых соотношениях, определяющих коэффициенты переноса, теплопроводность в твердых телах определяется по закону Фурье. В рамках этой гипотезы обычно постулируется линейная зависимость

тепловых потоков от термодинамических параметров [2, 3]. В кинетической теории предполагается, что совокупность движущихся квазичастиц (бозе-, или ферми-типа) [4] переносит тепло. Движение квазичастиц (эволюция их функции распределения) описывается как уравнением переноса Больцмана в квазиклассическом случае, так и более строгим аппаратом температурных функций Грина. Свободное квазиклассическое движение квазичастиц соответствует баллистическому способу переноса тепла, который реализуется в гармонических кристаллах. Влияние нелинейности и дефектов решетки, межатомных взаимодействий на теплообмен моделируется взаимодействиями (столкновениями) квазичастиц, в частности, подобные эффекты возникают в системах типа планарных полупроводниковых наноструктур при взаимодействии в них оптически возбужденных экситонов с акустическими фононами [5]. В результате столкновений квазичастицы могут совершать броуновское движение или блуждание по Леви. Первое соответствует классической фурье-модели теплообмена, а второе — аномаль-

* E-mail: eorlenko@mail.ru

ному теплообмену [6–8]. В [9] показано, что функция распределения квазичастиц является функцией Вигнера, а не Планка, как для свободных фононов. Уравнение, описывающее эволюцию функции Вигнера для гармонических кристаллов, было получено Мильке [10], а обобщение на слабо ангармонический случай сделано в [11].

Когерентный тепловой перенос, включая минимальную теплопроводность и локализацию Андерсона, интенсивно наблюдался в различных нанофононных кристаллах. Нанофононные кристаллы являются искусственными материалами, в которых волновая природа колебаний решетки проявляется явно в тепловых свойствах данных материалов [12–14]. Фононная когерентность была установлена в качестве основного источника различных уникальных явлений теплового переноса [12–14], таких как когерентный тепловой перенос и эффект удержания фононов. Недавние исследования обнаружили, что фононная когерентность оказывает значительное влияние на фонон-фононное рассеяние, фононные модальные корреляции и межфазное распространение фононов, которые отличаются от картины «чистых» частиц [15–17].

В работе [18], так же как и в [5], исследуется связь блоховских колебаний с продольными оптическими фононами, например, в узкоямной сверхрешетке $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}/\text{In}_{0,52}\text{Al}_{0,48}\text{As}$, где наблюдалось сильное увеличение амплитуд когерентных фононов, когда блоховские колебания впоследствии настраиваются в резонанс с различными модами оптических фононов [18]. Большинство проявлений когерентности тепловых фононов в экспериментальных исследованиях основаны на измерении теплопроводности и ее характерных изменений [13, 14]. Например, о существовании когерентных фононов косвенно свидетельствует экспериментальное наблюдение немонотонной зависимости теплопроводности от периода сверхрешетки [15–17, 19, 20]. В работе [14] когерентность фононных возбуждений исследуется путем расчета теплопроводности κ на основе подхода Грина–Кубо как автокорреляционная функция теплового потока $S(t)$, при этом предполагается, что выражение для удельной теплоемкости на моду сводится к классическому C_{λ}^{class} , если корреляционный член (автокорреляция числа фононов), учитывающий число фононов в данной моде, просто равен $N_{\lambda} = T/\hbar\omega_{\lambda}$, где T — температура в энергетической шкале. В случае преобладания «корпускулярно-подобного» поведения, корреляционный множитель $\text{Cor}(t)$ следует экспоненциальному закону затухания со временем жизни $\tau^{(p)}$

(particle), в соответствии с обычным приближением одномодового времени релаксации

$$\text{Cor}_{\lambda} = e^{-t/\tau^{(p)}}.$$

По мере увеличения эффекта когерентности при описании распада фононов здесь учитывается поправка, включающая модальное время когерентности τ_{λ}^c (coherent) следующим образом:

$$\text{Cor}_{\lambda} = \exp\left[\frac{t}{\tau^{(p)}}\right] \exp\left[-4\ln(2)\frac{t^2}{(\tau_{\lambda}^c)^2}\right].$$

При этом ожидалось, что когерентность окажет решающее влияние на фононный распад и его распространение, распад фононов должен следовать обобщенному закону, как показано в [14] для коэффициента теплопроводности

$$\kappa \propto \frac{1}{3} \sum_{\alpha, \lambda} C_{\lambda}^{class} v_{\lambda\alpha}^2 \tau_{\lambda}^c \exp\left[\frac{(\tau_{\lambda}^c)^2}{128(\tau_{\lambda}^p)^2}\right].$$

Однако экспериментально полученные зависимости аккумулятивной классической и квантовой теплопроводности для Ti_3VSe_4 при температурах 50 и 300 К показывают хорошее согласие между результатами вычислений методом молекулярной динамики (МД) и экспериментом для высокой температуры, когда «работает» классический предел, в то время как для температуры 50 К, когда ожидаемое в расчетах квадратичное (гауссовского типа) затухание демонстрирует существенное расхождение с экспериментом. Оценка этой обобщенной теплопроводности была реализована путем введения вейвлетного преобразования МД-величин, которое дает время когерентности фононных возбуждений, а также их время жизни.

Когерентные эффекты при переносе тепла проявляют себя также в недавно возникшем направлении — полупроводниковой оптомеханике, основанной на использовании экситонных поляритонов [21, 22]. Поляритоны являются смесью фотонов и материальных возбуждений [5]. В работе [5] теоретически исследовано взаимодействие оптически возбужденных экситонов с акустическими волнами в планарных полупроводниковых наноструктурах. Это взаимодействие приводит к сильной нелинейности в распространении звука в массивах квантовых ям, или в планарных полупроводниковых брэгговских микрорезонаторах, поддерживающих экситон-поляритонные моды.

В нашей работе мы покажем, что в кристалле с учетом взаимодействия колебаний кристалли-

ческой решетки с электронной подсистемой экситонной составляющей поляритона могут формироваться когерентные состояния, аналогичные состояниям Шредингера. Принимая во внимание константу нелинейного оптомеханического взаимодействия между оптически накачиваемыми экситонами и распространяющимися акустическими волнами, рассчитанную в работе [5], покажем, что когерентные состояния при тепловом транспорте действительно формируются в волновой пакет. В координатном представлении эти состояния являются не чем иным, как осциллятором со смещенным центром. Эти когерентные состояния с пуассоновским распределением по числу фононов в данной моде играют важную роль и приводят к характерным зависимостям тепловых потоков от времени. При определенных временах затухания фононов в полосе частот, связанной с этой константой, может формироваться не затухающий со временем тепловой поток (спектральная плотность потока в полосе частот). Такое поведение теплового потока напоминает сверхтеплопроводность, рассматриваемую в работах [22–27], для которой в литературе иногда используется термин «тепловая сверхпроводимость». Полупроводники, кубические кристаллы арсенида бора (BAs), как было недавно обнаружено [22–25], обладают сверхвысокой теплопроводностью по сравнению с большинством обычных материалов и демонстрируют большие перспективы для управления тепловым режимом в электронике [25–27].

2. ГАМИЛЬТониан, ОПИСЫВАЮЩИЙ КОГЕРЕНТНЫЕ СОСТОЯНИЯ ФОНОНОВ

Как известно, упругие колебания кристаллической решетки в классическом пределе могут рассматриваться как набор плоских волн с волновым вектором $\mathbf{k}$ и соответствующей частотой

$$\nu = c|\mathbf{k}|/2\pi = \omega/2\pi$$

(где ω — угловая частота) и поляризациями, например линейными, λ ($\lambda = 0, 1, 2$). При квантовом описании с учетом квантования амплитуд волн $|n_{\mathbf{k}\lambda}\rangle$ — это набор $n_{\mathbf{k}\lambda}$ фононов с импульсами $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ и энергиями $\varepsilon_k = \hbar\omega_k$ с соответствующей функцией распределения числа фононов в заданной моде $\mathbf{k}\lambda$:

$$n_{\mathbf{k}\lambda} = \frac{1}{e^{\hbar\omega_k/T} - 1},$$

где T — температура в энергетической шкале:

$$T = k_B T^\circ,$$

k_B — постоянная Больцмана, T° — температура в градусах. Соответствующие операторы рождения и уничтожения, $\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger$, $\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}$, фонона в заданном состоянии $|n_{\mathbf{k}\lambda}\rangle$ определяются через операторы обобщенных координат $\hat{Q}_{\mathbf{k}\lambda}$ и импульсов $\hat{P}_{\mathbf{k}\lambda}$ как

$$\begin{aligned}\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger &= \sqrt{\frac{m\omega_k}{2\hbar}} \left(\hat{Q}_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{\hat{P}_{\mathbf{k}\lambda}}{im\omega_k} \right), \\ \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} &= \sqrt{\frac{m\omega_k}{2\hbar}} \left(\hat{Q}_{\mathbf{k}\lambda} - \frac{\hat{P}_{\mathbf{k}\lambda}}{im\omega_k} \right),\end{aligned}$$

где m — масса иона кристаллической решетки. Соответствующие коммутационные соотношения для них, $[\hat{b}_{\mathbf{k}'\lambda'}, \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}\delta_{\lambda'\lambda}$, определяются известными условиями коммутации для операторов координат и импульсов (более подробно см. в Приложении). Таким образом, оператор вектора смещения n -го иона решетки $\hat{\xi}_n(\mathbf{r}, t)$ определяется как

$$\begin{aligned}\hat{\xi}_n(\mathbf{r}, t) &= \\ &= \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_k}} \left[\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} e^{-i\omega_k t} \mathcal{A}_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) + \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger e^{i\omega_k t} \mathcal{A}_{\mathbf{k}\lambda}^*(\mathbf{r}) \right].\end{aligned}\quad (1)$$

Здесь

$$\mathcal{A}_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} e_{\mathbf{k}\lambda} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

— координатная часть амплитуды гармоник (моды) $\mathbf{k}\lambda$,

$$\begin{aligned}\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}(t) &= \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} e^{-i\omega_k t}, \\ \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger(t) &= \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger e^{i\omega_k t}.\end{aligned}$$

Соответствующий гамильтониан, описывающий свободные колебания кристаллической решетки, имеет вид

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}^0 &= \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{m}{2} \hat{\xi}_i^2 + \frac{\gamma}{2} (\hat{\xi}_i - \hat{\xi}_{i-1})^2 \right\} = \\ &= \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hbar\omega_k \left(\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right).\end{aligned}\quad (2)$$

Здесь γ — «коэффициент жесткости» решетки, который определяется потенциалом взаимодействия соседних ионов:

$$\gamma = \frac{\partial^2}{\partial x^2} U(x).$$

В изотропной среде деформационный потенциал

$$W_d = -\gamma \text{Sp} \hat{\xi}$$

определяет оператор энергии взаимодействия атома (иона, или любого дефекта, имеющего электронную структуру) с акустическими фононами [28]:

$$\hat{W}_d \equiv \hat{V}_{eph} = -\gamma \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \left\{ \sqrt{\frac{N}{2m\hbar\omega_k}} \times \right. \\ \times (i\mathbf{e}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{k}_{i \rightarrow f}) \hat{c}_{f\sigma'}^\dagger \hat{c}_{i\sigma} \times \\ \left. \times \left(b_{\mathbf{k}, \lambda}(t) e^{i\mathbf{k}\lambda \cdot \mathbf{r}} - b(t)_{-\mathbf{k}, \lambda}^+ e^{-i\mathbf{k}\lambda \cdot \mathbf{r}} \right) \right\}, \quad (3)$$

Здесь операторы $\hat{c}_{f\sigma'}^\dagger, \hat{c}_{i\sigma}$ — операторы рождения и уничтожения электронов в указанных, например экситонных, состояниях $|\eta_{i\sigma}\rangle, |\eta_{f\sigma'}\rangle$ являются операторами фермионного типа. Здесь вектор $|\eta_{i\sigma}\rangle$ означает начальное состояние электрона в экситонном состоянии, которое включает в себя спин электрона с проекцией σ . С электроном, находящемся в указанном состоянии, взаимодействуют фононы, число которых в данной моде $\mathbf{k}\lambda$ обозначено как $n_{\mathbf{k}\lambda}^{(i)}$. Тогда начальное состояние системы, «экситон + фонон» будет описываться как $|i\rangle = |n_{\mathbf{k}\lambda}^{(i)} \eta_{i\sigma}\rangle$. При взаимодействии с фононами, описываемом оператором «электрон»-фононного взаимодействия $\hat{V}_{eph}$, атомная система, или «электронная среда», переходит в конечное состояние f (или $|f\rangle = |n_{\mathbf{k}\lambda}^{(f)} \eta_{f\sigma'}\rangle$). В этом случае набор всех квантовых чисел, характеризующих электронную систему, обозначим как $\eta_{f\sigma'}$ с учетом их спинового состояния σ' , а состояние фононной системы с числом фононов в данной моде $\mathbf{k}\lambda$ как $n_{\mathbf{k}\lambda}^{(f)}$.

В результате данного взаимодействия один или более фононов в определенном поляризационном состоянии и с определенными импульсами испущены или поглощены «электронной средой». Разница в импульсе и поляризации «электронной среды», инициируемая излучением или поглощением фононов, по сути, определяет поляризационные характеристики испускаемых или поглощаемых фононов. Этот процесс описывается дифференциальной вероятностью перехода, $dw_{fi}^{(a)}$ (для абсорбции) и $dw_{fi}^{(e)}$ (для испускания). Необходимо подчеркнуть, что вообще говоря, начальное и конечное возбужденные состояния «электронной среды» не являются стационарными. Они не только пропорциональны соответствующим осциллирующим во времени множителям,

$$|\eta_i\rangle \propto \exp(-iE_i t/\hbar), \quad |\eta_f\rangle \propto \exp(-iE_f t/\hbar),$$

но также являются релаксирующими к соответствующим основным состояниям с частотами релакса-

ции γ_i и γ_f или так называемыми вероятностями релаксации в единицу времени:

$$|\eta_i\rangle \propto \exp(-iE_i t/\hbar - \gamma_i t), \\ |\eta_f\rangle \propto \exp(-iE_f t/\hbar - \gamma_f t),$$

которые определяют ширину спектральной линии. Принимая во внимание относительную малость константы взаимодействия электронной системы с колебаниями решетки, это взаимодействие можно последовательно описывать методами теории возмущений. В соответствии с общими формулами стационарной теории возмущений с возмущением, явно зависящим от времени, вероятность $P_{fi}(t)$ перехода из начального состояния $|i\rangle$ системы фононов + «электронная среда» в конечное состояние $|f\rangle$ под действием возмущения, действующего в интервале времени $[0, t]$, можно представить в виде разложения по вкладам, учитывающих одно-, двух-, трех-фононные и т. д. переходы.

Для однофононного перехода, сопровождающегося эмиссией (e), или абсорбцией (a) одного фонона, характеризующегося набором квантовых чисел $\pi_p \equiv \{\mathbf{k}, \lambda, \omega_k\}$, вероятность этого процесса определяется тогда следующей формулой:

$$\hat{V}(t') = \hat{V}^{(e)}(\pi_p) e^{i\omega_k t'} + \hat{V}^{(a)}(\pi_p) e^{-i\omega_k t'}, \quad (4)$$

где

$$\hat{V}^{(e)}(\pi_p) = -\gamma \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_k}} \hat{b}_{k\lambda}^\dagger(0) \mathcal{A}_{\mathbf{k}\lambda}^*(\mathbf{r}), \\ \hat{V}^{(a)}(\pi_p) = -\gamma \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_k}} \hat{b}_{k\lambda}(0) \mathcal{A}_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}). \quad (5)$$

Описание процесса взаимодействия фононов и электронной системы с поляризацией, обусловленной деформационным потенциалом, проводится с учетом как вклада свободных тепловых колебаний кристалла, см. формулу (2), так и собственно вклада электрон-фононного взаимодействия:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}^0 + \hat{V}(t') = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \left\{ \hbar\omega_k \left(\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right) + \right. \\ \left. + \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \langle \eta_f | (-\gamma) e \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_k N}} \mathbf{e}_{k\lambda} \cdot i\mathbf{k} \hat{c}_f^\dagger \hat{c}_i | \eta_i \rangle \times \right. \\ \left. \times \left(\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger(t') + \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}(t') \right) \right\}, \quad (6)$$

Под матричными элементами $\langle \eta_f | \hat{V}_{eph} | \eta_i \rangle$, вычисленными по начальному и конечному состояниям

электронной системы, можно понимать также эффекты, обусловленные взаимодействием с экситонной поляризацией и подробно описанные в [5]. Здесь константу упругого взаимодействия γ следует заменить на константу Ξ , которая, помимо константы деформационного потенциала γ , приблизительно равной 10 эВ, содержит еще вклад поляризационного потенциала $\varepsilon|P|^2$, где $\varepsilon = 4\pi\Xi^2/\omega\mathcal{E}$, P — амплитуда экситонной поляризации, $\mathcal{E}$ — модуль Юнга. Расчет матричных элементов $\langle \eta_f | \hat{V}_{eph} | \eta_i \rangle$ приводит к гамильтониану, описывающему колебания решетки с учетом влияния электронной системы на фононную, например, с учетом экситон-фононного взаимодействия:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} &= \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}\lambda} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \left\{ \hbar\omega_k \left(\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right) - \right. \\ &\quad \left. \Lambda_{\mathbf{k}\lambda} \left\{ \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger + \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} \right\} \right\}, \\ \Lambda_{\mathbf{k}\lambda} &= e\Xi e_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{k} \sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega_k N}}, \\ \Xi &= \gamma \left(1 + \frac{4\pi\gamma^2}{\omega\mathcal{E}} |P|^2 \right). \end{aligned} \quad (7)$$

По своей форме описание фононной системы с помощью гамильтониана (7) совпадает с описанием оптических полей, взаимодействующих с веществом (электронной системой). Для последних показано, что наиболее приемлемым базисом является отнюдь не базис «фоковских» состояний с определенным числом фотонов в заданной моде и неопределенной фазой, а базис когерентных состояний, который в отличие от «фоковских» имеет переменное число частиц (в оптическом смысле фотонов), но при этом определенную фазу [29]. (Более подробно см. Приложение.)

3. КОГЕРЕНТНЫЕ СОСТОЯНИЯ ФОНОНОВ

Рассмотрим подробнее полученный гамильтониан (7), вернее его составляющую, отвечающую моде $(\mathbf{k}\lambda)$:

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}\lambda} = \hbar\omega_k \left(\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right) - \Lambda_{\mathbf{k}\lambda} \left\{ \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger + \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} \right\}. \quad (8)$$

Для его диагонализации мы совершим унитарное преобразование — такое, которое связывает исходные (старые) операторы рождения/уничтожения частицы в осцилляторном состоянии с новыми опе-

раторами рождения и уничтожения следующим образом:

$$\begin{aligned} \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger &= B_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger + u_{\mathbf{k}\lambda}^*, \\ \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} &= B_{\mathbf{k}\lambda} + u_{\mathbf{k}\lambda}. \end{aligned} \quad (9)$$

где $u_{\mathbf{k}\lambda}$ — некоторая в общем случае комплексная функция. Они также удовлетворяют коммутационному соотношению бозонного типа:

$$[B_{\mathbf{k}'\lambda'}, B_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \delta_{\lambda'\lambda}.$$

Подставляя выражение (9) в гамильтониан (8) и проводя диагонализацию, имеем

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}\lambda} = \hbar\omega_k \left(B_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger B_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right) - \frac{2(\Lambda_{\mathbf{k}\lambda})^2}{\hbar\omega_k}. \quad (10)$$

Для этого необходимо, чтобы функция $u_{\mathbf{k}\lambda}$ была чисто вещественной:

$$u_{\mathbf{k}\lambda} = \frac{\Lambda_{\mathbf{k}\lambda}}{\hbar\omega_k}. \quad (11)$$

Известно, что подобное линейное преобразование операторов рождения/уничтожения (11) осуществляется оператором унитарного преобразования $\hat{U} = e^{\hat{D}}$ (где $\hat{D} = \hat{D}^\dagger$ — эрмитов оператор):

$$B = e^{-\hat{D}} \hat{b} e^{\hat{D}} = \hat{b} + \frac{\Lambda_{\mathbf{k}\lambda}}{\hbar\omega_k}, \quad (12)$$

где индексы $(\mathbf{k}\lambda)$ у операторов $\hat{b}^\dagger$ и $\hat{b}$ пока опущены. Поскольку состояния с различными $(\mathbf{k}\lambda)$ являются независимыми, ортогональными, мы можем, не умаляя общности рассуждений, эти индексы опустить с целью избежать громоздкости записи. Ищем оператор $\hat{D}$ в виде

$$\hat{D} = \alpha(\hat{b}^\dagger - \hat{b}),$$

с вещественной функцией

$$\alpha = \frac{\Lambda_{\mathbf{k}\lambda}}{\hbar\omega_k}.$$

Оператор унитарного преобразования в общем случае имеет вид

$$\hat{U}(\alpha) = e^{(\alpha\hat{b}^\dagger - \alpha\hat{b})}.$$

Он преобразует «старую» функцию вакуума $|n_{\mathbf{k}\lambda}\rangle = |0\rangle$ в соответствующий «новый» вакуум:

$$\begin{aligned} |\nu_{\mathbf{k}\lambda} = 0\rangle &= |\alpha\rangle = \hat{U}(\alpha) |n_{\mathbf{k}\lambda} = 0\rangle = \\ &= e^{(\alpha\hat{b}^\dagger - \alpha\hat{b})} |n_{\mathbf{k}\lambda} = 0\rangle. \end{aligned} \quad (13)$$

Принимая во внимание равенство Бэйкера – Кэмпбелла – Хаусдорфа, получаем

$$e^{\alpha^* \hat{b}^\dagger - \alpha \hat{b}} |n_{\mathbf{k}\lambda} = 0\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} e^{\alpha^* \hat{b}^\dagger} e^{-\alpha \hat{b}} |n_{\mathbf{k}\lambda} = 0\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(\alpha^*)^\nu}{\sqrt{\nu!}} |\nu\rangle = |\alpha\rangle_{\mathbf{k}\lambda}. \quad (14)$$

Мы учли также, что $\hat{b}|n=0\rangle \equiv 0$. Полученная суперпозиция осцилляторных состояний с различным числом фононов в данной моде представляет собой когерентное состояние, аналогичное глауберовским фотонным состояниям. Понятие когерентных состояний введено Шредингером в 1926 г. Они являются собственными состояниями полученного гамильтониана (13) и соответствуют энергии, учитывающей взаимодействие с электронной подсистемой:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}\lambda} = \hbar\omega_k \left(\alpha_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right) - \frac{2(\Lambda_{\mathbf{k}\lambda})^2}{\hbar\omega_k}. \quad (15)$$

Для них справедливы следующие выражения (см. подробно [29]):

$$\begin{aligned} \hat{b} |\alpha\rangle_{\mathbf{k}\lambda} &= \alpha_{\mathbf{k}\lambda} |\alpha\rangle_{\mathbf{k}\lambda}, \\ \alpha_{\mathbf{k}\lambda} &= \frac{\Lambda_{\mathbf{k}\lambda}}{\hbar\omega_k}, \end{aligned} \quad (16)$$

которым отвечает собственное значение энергии (15), где среднее число фононов в когерентном состоянии, соответствующее данной моде, равно

$$\begin{aligned} \langle n \rangle_{\mathbf{k}\lambda} &= \langle \alpha | \hat{b}^\dagger \hat{b} | \alpha \rangle_{\mathbf{k}\lambda} = |\alpha|_{\mathbf{k}\lambda}^2, \\ |\alpha\rangle_{\mathbf{k}\lambda} &= e^{-\langle n \rangle_{\mathbf{k}\lambda}/2} \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle_{\mathbf{k}\lambda} \frac{\sqrt{\langle n \rangle_{\mathbf{k}\lambda}}^n}{\sqrt{n!}}, \end{aligned} \quad (17)$$

а функция распределения по числу фононов в данной моде отвечает распределению Пуассона (см. Приложение)

$$W_{\mathbf{k}\lambda}(n) = e^{-\langle n \rangle_{\mathbf{k}\lambda}} \frac{\langle n \rangle_{\mathbf{k}\lambda}^n}{n!}. \quad (18)$$

С учетом (16), (17), а также того, что сама константа взаимодействия для данной моды $\Lambda_{\mathbf{k}\lambda}$ все-таки является сложной функцией частоты (7), полученные когерентные состояния носят специфический характер и зависят от частоты распространяющейся моды колебаний. Здесь

$$\langle n \rangle_{\mathbf{k}\lambda} = |\alpha|_{\mathbf{k}\lambda}^2 \propto \frac{1}{\omega_k^3}.$$

4. ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ ВРЕМЕННОЙ ЗАДАЧИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФОНОНОВ С ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДСИСТЕМОЙ. ПОТОК ЭНЕРГИИ

Рассмотрим ситуацию, когда оптомеханическое взаимодействие между оптически накачиваемыми экситонами и распространяющимися акустическими волнами содержит явную зависимость от времени, обусловленную поляритонной генерацией экситонов при воздействии на наноструктуру лазерного импульса. Тогда

$$\Lambda_{\mathbf{k}\lambda}(t) = e\Xi(t) \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{k} \sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega_k N}} \langle \eta_f(t) | \hat{c}_f^\dagger \hat{c}_i | \eta_i(t) \rangle. \quad (19)$$

Соответствующим образом гамильтониан такой системы переписывается как

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}\lambda}(t) = \hbar\omega_k \left(\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right) - \Lambda_{\mathbf{k}\lambda}(t) \left\{ \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger + \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} \right\}.$$

Мы рассматриваем решение для каждой моды колебаний независимо. В этом случае необходимо решать нестационарное уравнение Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(t)}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}\lambda}(t) \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(t). \quad (20)$$

Как и в [30], общий вид решения будем искать в виде

$$\begin{aligned} \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(t) &= \\ &= C_{\mathbf{k}\lambda}(t) e^{\alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t) \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger} e^{\beta_{\mathbf{k}\lambda}(t) \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}} e^{\gamma_{\mathbf{k}\lambda}(t) \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}} \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(-\infty), \end{aligned} \quad (21)$$

где $\Psi_{\mathbf{k}\lambda}(-\infty)$ — волновой вектор системы в начальном состоянии до воздействия на нее электронного возмущения, $\alpha(t)$, $\beta(t)$, $\gamma(t)$ — искомые функции времени. Подставляя (21) в (20) и принимая во внимание следующие коммутационные соотношения [30]:

$$\begin{aligned} [e^{\beta_{\mathbf{k}\lambda} \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}}, \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger] &= \beta_{\mathbf{k}\lambda} e^{\beta_{\mathbf{k}\lambda} \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}}, \Rightarrow \\ &\Rightarrow e^{\beta_{\mathbf{k}\lambda} \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}} \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger e^{-\beta_{\mathbf{k}\lambda} \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}} = (\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger + \beta_{\mathbf{k}\lambda}) e^{\beta_{\mathbf{k}\lambda} \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}}, \\ [e^{\alpha_{\mathbf{k}\lambda} \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger}, \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}] &= -\alpha_{\mathbf{k}\lambda} e^{\alpha_{\mathbf{k}\lambda} \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger}, \Rightarrow \\ &\Rightarrow e^{\alpha_{\mathbf{k}\lambda} \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger} \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} e^{-\alpha_{\mathbf{k}\lambda} \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger} = (\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} - \alpha_{\mathbf{k}\lambda}) e^{\alpha_{\mathbf{k}\lambda} \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger}, \end{aligned} \quad (22)$$

приходим к уравнению (для каждой моды $\mathbf{k}, \lambda$)

$$\begin{aligned} i\hbar \left\{ \frac{\dot{C}(t)}{C(t)} + \dot{\alpha}(t) \hat{b}^\dagger + \dot{\beta}(t) (\hat{b} - \alpha(t)) + \right. \\ \left. + (\hat{b}^\dagger + \beta) (\hat{b} - \alpha(t)) \dot{\gamma}(t) \right\} \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(t) = \\ = \left\{ \hbar\omega_k (\hat{b}^\dagger \hat{b} + \frac{1}{2}) - \Lambda(t) (\hat{b}^\dagger + \hat{b}) \right\} \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(t). \end{aligned} \quad (23)$$

Компонуя коэффициенты при комбинациях операторов рождения/уничтожения в данной моде, получаем

$$\begin{aligned} i\hbar \left\{ \left(\frac{\dot{C}_{\mathbf{k}\lambda}(t)}{C_{\mathbf{k}\lambda}(t)} - \dot{\beta}_{\mathbf{k}\lambda}(t)\alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t) - \beta_{\mathbf{k}\lambda}\alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t)\dot{\gamma}_{\mathbf{k}\lambda}(t) \right) + \right. \\ \left. + (\dot{\alpha}_{\mathbf{k}\lambda}(t) - \alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t)\dot{\gamma}_{\mathbf{k}\lambda}(t))\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger + \right. \\ \left. + (\dot{\beta}_{\mathbf{k}\lambda}(t) + \beta_{\mathbf{k}\lambda}(t)\dot{\gamma}_{\mathbf{k}\lambda}(t))\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} + \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}\dot{\gamma}_{\mathbf{k}\lambda}(t) \right\} \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(t) = \\ = \left\{ \hbar\omega_{\mathbf{k}}(\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2}) - \Lambda_{\mathbf{k}\lambda}(t)(\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger + \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}) \right\} \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(t). \end{aligned} \quad (24)$$

Приравнивая коэффициенты при соответствующих комбинациях операторов рождения/уничтожения в данной моде слева и справа, приходим к системе уравнений для определения искомых функций $\alpha(t)$, $\beta(t)$, $\gamma(t)$, которая является общей для различных начальных условий:

1) для коэффициентов, стоящих при операторе $\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}$, имеем уравнение

$$i\hbar\dot{\gamma}_{\mathbf{k}\lambda}(t) = \hbar\omega_{\mathbf{k}};$$

2) для коэффициентов, стоящих при операторе $\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}$, имеем уравнение

$$i\hbar(\dot{\beta}_{\mathbf{k}\lambda}(t) + \beta_{\mathbf{k}\lambda}(t)\dot{\gamma}_{\mathbf{k}\lambda}(t)) = -\Lambda_{\mathbf{k}\lambda}(t);$$

3) для коэффициентов, стоящих при операторе $\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger$, имеем уравнение

$$i\hbar(\dot{\alpha}_{\mathbf{k}\lambda}(t) - \alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t)\dot{\gamma}_{\mathbf{k}\lambda}(t)) = -\Lambda_{\mathbf{k}\lambda};$$

4) для свободных членов имеем уравнение

$$i\hbar \left(\frac{\dot{C}_{\mathbf{k}\lambda}(t)}{C_{\mathbf{k}\lambda}(t)} - \dot{\beta}_{\mathbf{k}\lambda}(t)\alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t) - \beta_{\mathbf{k}\lambda}\alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t)\dot{\gamma}_{\mathbf{k}\lambda}(t) \right) = \frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2}.$$

Таким образом, приходим к системе уравнений, определяющей в общем виде решение временной задачи:

$$\begin{aligned} \dot{\gamma}_{\mathbf{k}\lambda}(t) &= -i\omega_{\mathbf{k}}, \\ \dot{\beta}_{\mathbf{k}\lambda}(t) - i\omega_{\mathbf{k}}\beta_{\mathbf{k}\lambda}(t) &= \frac{i\Lambda_{\mathbf{k}\lambda}(t)}{\hbar}, \\ \dot{\alpha}_{\mathbf{k}\lambda}(t) + i\omega_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t) &= \frac{i\Lambda_{\mathbf{k}\lambda}(t)}{\hbar}, \\ \frac{\dot{C}_{\mathbf{k}\lambda}(t)}{C_{\mathbf{k}\lambda}(t)} - \alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t)(\dot{\beta}_{\mathbf{k}\lambda}(t) - \beta_{\mathbf{k}\lambda}(t)i\omega_{\mathbf{k}}) &= -\frac{i}{2}\omega_{\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (25)$$

Отсюда получаем общий вид решений для искомых коэффициентов, полностью определяющих волновую функцию (волновой вектор) в любой момент времени:

$$\begin{aligned} C_{\mathbf{k}\lambda}(t) &= \exp\left(-i\frac{\omega_{\mathbf{k}}t}{2}\right) \exp\left\{-\frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^t dt' \times \right. \\ &\times \left. \left(\Lambda_{\mathbf{k}\lambda}(t')e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t'} \int_{-\infty}^{t'} dt'' \left(\Lambda_{\mathbf{k}\lambda}(t'')e^{i\omega_{\mathbf{k}}t''} \right) \right) \right\}, \\ \alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t) &= \frac{ie^{-i\omega_{\mathbf{k}}t}}{\hbar} \int_{-\infty}^t \Lambda_{\mathbf{k}\lambda}(t')e^{i\omega_{\mathbf{k}}t'} dt', \\ \beta_{\mathbf{k}\lambda}(t) &= \frac{ie^{i\omega_{\mathbf{k}}t}}{\hbar} \int_{-\infty}^t \Lambda_{\mathbf{k}\lambda}(t')e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t'} dt', \\ \gamma_{\mathbf{k}\lambda}(t) &= -i\omega_{\mathbf{k}}t. \end{aligned} \quad (26)$$

Далее мы рассматриваем возможное решение задачи, которая соответствует экспериментам типа [18], когда когерентная суперпозиция электронных состояний получается в результате воздействия на электронную систему ультракоротких лазерных импульсов. До воздействия поля лазера система изначально находилась в вакуумном состоянии по всем модам $\Psi_{\mathbf{k}\lambda}(-\infty) = |0\rangle_{\mathbf{k}\lambda}$. Начальные условия можно взять в виде

$$\begin{aligned} \alpha_{\mathbf{k}\lambda}(-\infty) &= 0, \\ \beta_{\mathbf{k}\lambda}(-\infty) &= 0, \\ C_{\mathbf{k}\lambda}(-\infty) &= 1. \end{aligned} \quad (27)$$

Рассмотрим для примера эволюцию фононного «волнового пакета», появление которого обусловлено взаимодействием с электронным волновым пакетом, генерированным экситонной компонентой поляритона, и описываемого матричным элементом в (19) $\langle \eta_f(t) | \hat{c}_f^\dagger \hat{c}_i | \eta_i(t) \rangle$, что является временным сигналом $\Lambda(t)$ «электрон-фононного взаимодействия» в виде функции

$$\Lambda_{\mathbf{k}\lambda}(t) = \Lambda_{\mathbf{k}\lambda_0} e^{-\frac{|t|}{\tau}}, \quad (28)$$

Тогда, используя полученные общие выражения (28) для коэффициентов $C_{\mathbf{k}\lambda}(t)$, $\alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t)$, $\beta_{\mathbf{k}\lambda}(t)$, $\gamma_{\mathbf{k}\lambda}(t)$, по-

лучаем явные зависимости от времени:

$$\begin{aligned}\alpha_{\omega}(t) &= \frac{ie^{-i\omega t}}{\hbar} \int_{-\infty}^t \Lambda_0 e^{-|t'|/\tau} e^{i\omega t'} dt' = \\ &= \frac{ie^{-i\omega t}}{\hbar} \Lambda_0 \left\{ \frac{2\tau}{1+(\tau\omega)^2} - \frac{\tau e^{-t/\tau} e^{i\omega t}}{1-i\tau\omega} \right\} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \\ &\xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{ie^{-i\omega t}}{\hbar} \Lambda_0 \frac{2\tau}{1+(\tau\omega)^2}, \\ \beta_{\omega}(t) &= \frac{ie^{i\omega t}}{\hbar} \Lambda_0 \int_{-\infty}^t e^{-|t'|/\tau} e^{-i\omega t'} dt' = \\ &= \frac{ie^{i\omega t}}{\hbar} \Lambda_0 \frac{2\tau}{1+(\tau\omega)^2}, \quad \gamma(t) = -i\omega t,\end{aligned}\quad (29)$$

$$\begin{aligned}C_{\omega}(t) &= e^{-i\omega t/2} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^t dt' \times \right. \\ &\times \left. \left(\Lambda_0 e^{-|t'|/\tau} e^{-i\omega t'} \int_{-\infty}^{t'} dt'' \left(\Lambda_0 e^{-|t''|/\tau} e^{i\omega t''} \right) \right) \right\} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \\ &\xrightarrow{t \rightarrow \infty} e^{-i\omega t/2} \exp \left\{ -\frac{\Lambda_0^2}{2\hbar^2} \left[\frac{2/\tau}{(1/\tau)^2 + \omega^2} \right]^2 \right\}.\end{aligned}\quad (30)$$

Принимая во внимание начальные условия (27), (28), можно записать волновую функцию в виде

$$\begin{aligned}\Psi_{\mathbf{k}\lambda}(t) &= C_{\mathbf{k}\lambda}(t) e^{\alpha(t)b^\dagger} e^{\beta(t)b} e^{\gamma(t)b^\dagger b} |0\rangle = \\ &= C_{\mathbf{k}\lambda}(t) \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{\alpha_{\mathbf{k}\lambda}^\nu(t)}{\nu!} b_{\mathbf{k}\lambda}^{\dagger \nu} |0\rangle = C_{\mathbf{k}\lambda}(t) \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{\alpha_{\mathbf{k}\lambda}^\nu(t)}{\sqrt{\nu!}} |\nu\rangle, \\ e^{\beta_{\mathbf{k}\lambda}(t)b_{\mathbf{k}\lambda}} e^{\gamma_{\mathbf{k}\lambda}(t)b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger b_{\mathbf{k}\lambda}} |0\rangle &= \\ &= e^{\beta(t)b} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{\gamma_{\mathbf{k}\lambda}^\nu(t)}{\nu!} \hat{n}_{\mathbf{k}\lambda}^\nu |0\rangle = e^{\beta_{\mathbf{k}\lambda}(t)b_{\mathbf{k}\lambda}} \cdot \hat{1} |0\rangle = |0\rangle.\end{aligned}\quad (31)$$

Легко показать при этом, что условие нормировки волнового вектора при полученных значениях коэффициентов (29), (30) полностью удовлетворяется:

$$\begin{aligned}\langle \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(t) | \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(t) \rangle &= |C_{\mathbf{k}\lambda}(t)|^2 \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{|\alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t)|^{2\nu}}{\nu!} = \\ &= |C_{\mathbf{k}\lambda}(t)|^2 e^{|\alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t)|^2} = 1, \\ |C_{\mathbf{k}\lambda}(t)|^2 &= e^{-|\alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t)|^2} \Rightarrow |C_{\mathbf{k}\lambda}(t)| = e^{-|\alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t)|^2/2} = \\ &= \exp \left\{ -\frac{\Lambda_0^2}{2\hbar^2} \left[\frac{2\tau}{1+(\omega_{\mathbf{k}}\tau)^2} \right]^2 \right\},\end{aligned}\quad (32)$$

$$\begin{aligned}|\alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t)|^2 &= \left(2\frac{\Lambda_0\tau}{\hbar} \right)^2 \left\{ \frac{1}{(1+(\tau\omega_{\mathbf{k}})^2)^2} - \right. \\ &- \frac{e^{-t/\tau}}{(1+(\tau\omega_{\mathbf{k}})^2)^{3/2}} \cos(\omega_{\mathbf{k}}t + \arctg(\omega_{\mathbf{k}}\tau)) + \\ &+ \left. \frac{e^{-2t/\tau}}{4(1+(\tau\omega_{\mathbf{k}})^2)} \right\} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \left(\frac{2\tau\Lambda_0}{\hbar} \right)^2 \frac{1}{(1+(\tau\omega_{\mathbf{k}})^2)^2}.\end{aligned}\quad (33)$$

Тогда тепловой поток энергии, переносимой фононами в когерентных состояниях определяется как

$$\begin{aligned}\langle j \rangle_{\mathbf{k}\lambda} &= \hbar\omega_{\mathbf{k}}c_s \langle \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(t) | \hat{n}_{\mathbf{k}\lambda} | \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(t) \rangle = \\ &= \hbar\omega_{\mathbf{k}}c_s |C_{\mathbf{k}\lambda}(t)|^2 \sum_{\nu=0}^{\infty} \nu \frac{|\alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t)|^{2\nu}}{\nu!} = \\ &= \hbar\omega_{\mathbf{k}}c_s |\alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t)|^2 |C_{\mathbf{k}\lambda}(t)|^2 e^{|\alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t)|^2},\end{aligned}\quad (34)$$

где c_s — скорость звука в кристалле (фазовая скорость для данной моды):

$$c_s = \frac{\omega_k}{k}.$$

С учетом условия нормировки (32) спектральная плотность потока тепловой энергии будет равна

$$\begin{aligned}\langle j \rangle_{\omega} &= \frac{d\varepsilon}{d\omega} = \hbar\omega c_s \frac{g_s\omega^2}{(2\pi)^3 c_s^3} \frac{2\pi}{3} |\alpha_{\omega}(t)|^2 = \\ &= \hbar\omega \frac{\omega^2}{(2\pi)^2 c_s^2} \left(\frac{2\Lambda_0\tau}{\hbar} \right)^2 \left\{ \frac{1}{(1+(\tau\omega)^2)^2} - \right. \\ &\frac{e^{-t/\tau} \cos(\omega t + \arctg(\omega\tau))}{(1+(\tau\omega)^2)^{3/2}} + \left. \frac{e^{-2t/\tau}}{4(1+(\tau\omega)^2)} \right\} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \\ &\xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{\hbar\omega^3}{c_s^2} \left(\frac{2\tau\Lambda_0}{2\pi\hbar} \right)^2 \frac{1}{(1+(\tau\omega)^2)^2}.\end{aligned}\quad (35)$$

Для промежутка времени $T = 2\pi/\omega \ll t < \tau$ плотность потока будет иметь вид

$$\begin{aligned}\langle j \rangle_{\omega} &= \hbar\omega \frac{\omega^2}{(2\pi)^2 c_s^2} \left(\frac{2\Lambda_0\tau}{\hbar} \right)^2 \times \\ &\times \left\{ \frac{1}{(1+(\tau\omega)^2)^2} + \frac{e^{-2t/\tau}}{4(1+(\tau\omega)^2)} \right\}.\end{aligned}\quad (36)$$

Для промежутка $\tau < t \rightarrow \infty$ имеем

$$\langle j \rangle_\omega = \frac{d\varepsilon}{d\omega} = \hbar\omega \frac{g_s \omega^2}{(2\pi)^3 c_s^2} \frac{2\pi}{3} |\alpha_\omega(t)|^2 \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{\hbar\omega^3}{c_s^2} \left(\frac{\tau\Lambda_0}{\pi\hbar} \right)^2 \frac{1}{(1 + (\tau\omega)^2)^2}. \quad (37)$$

Тогда полный квантово-механический поток энергии, переносимый когерентными фононами, без учета теплового фактора определяется как интеграл

$$\begin{aligned} J &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle j \rangle_\omega d\omega = \int_{-\omega_D}^{\omega_D} \frac{|\alpha(t)|^2}{4\pi^2 c_s^2} \hbar\omega^2 d\omega = \\ &= \left(\frac{\tau\Lambda_0}{\pi\hbar} \right)^2 \frac{2\hbar}{c_s^2} \left\{ \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^3}{(1 + (\tau\omega)^2)^2} d\omega + \right. \\ &\quad \left. + \frac{e^{-2t/\tau}}{4} \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^3}{(1 + (\tau\omega)^2)^2} d\omega \right\} = \\ &= \left(\frac{\Lambda_0}{\tau\pi} \right)^2 \frac{2}{\hbar c_s^2} \left\{ \left(1 - \frac{e^{-2t/\tau}}{2} \right) \ln(1 + (\tau\omega_D)^2) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{(1 + (\tau\omega_D)^2)} - 1 + \frac{e^{-2t/\tau}}{2} (\tau\omega_D)^2 \right\}, \quad (38) \end{aligned}$$

С учетом выражения для скорости звука,

$$c_s = \frac{\omega_D}{2\pi} \sqrt[3]{\left(\frac{4\pi}{3n} \right)}, \quad (39)$$

полное выражение для потока энергии будет иметь вид

$$\begin{aligned} J &= 3nc_s \frac{\Lambda_0}{(\tau\omega_D)^2} \times \\ &\times \frac{\Lambda_0}{\hbar\omega_D} \left\{ \left(1 - \frac{e^{-2t/\tau}}{2} \right) \ln(1 + (\tau\omega_D)^2) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{(1 + (\tau\omega_D)^2)} - 1 + \frac{e^{-2t/\tau}}{2} (\tau\omega_D)^2 \right\}. \quad (40) \end{aligned}$$

Указанная зависимость полного потока энергии от комбинации внутренних характеристик кристалла, таких как частота Дебая ω_D и время когерентности τ , представлены на рис. 1. Хорошо видно, что при определенных соотношениях указанных параметров, а именно $x = \tau\omega_D \sim 2$, величина полного потока энергии не затухает со временем. Принимая во внимание указанные в работе [1]

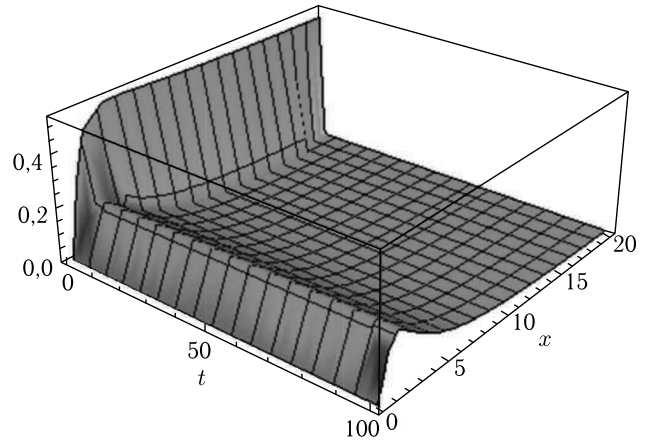


Рис. 1. Полный поток энергии как функция времени $t = t/\tau$ и обратного времени затухания $x = \omega_D \tau$. При $x \sim 2$ наблюдается максимум потока и отсутствие затухания потока от времени

для арсенида бора (BAs) частоты Дебая акустических фононов $\omega_D \sim 12.8$ ТГц и характерные времена когерентности $\tau \sim 10^{-13}$ с, мы видим, что они укладываются в указанную оценку, что можно связать с установлением режима супертеплопроводности [1, 24–27, 31, 32]. В работе [32] изучается динамика когерентных оптических фононов в теллуре после интенсивного воздействия фемтосекундного лазерного импульса. Основным механизмом аномальных тепловых явлений в материале, вплоть до «нетемпературного» фазового перехода, считается так называемый DECP (Displacive Excitation of Coherent Phonons). Показано, что время, необходимое носителю для диффузии на одну длину поглощения (50 нм), составляет около 600 фс = $6 \cdot 10^{-13}$ с, характерные частоты, на которых наблюдаются резонансные эффекты теплопроводности, равны 3–3.6 ТГц. Наша оценка параметра $x = \tau\omega$ составляет для данной системы $x = \tau\omega = 1.8$ –2.16, что соответствует незатухающему потоку энергии, представленному на рис. 1.

Более того, чтобы не прибегать при оценке поведения наноразмерных объектов к справочным значениям скорости звука в кристалле или частоты Дебая, полученным для макроскопических материалов, можно воспользоваться микроскопическим значением частоты Дебая как максимально возможным значением частоты распространения гармонического возбуждения, соответствующим минимальной длине волны, равной двум постоянным решетки

а конкретного нанокристалла:

$$\omega_{max} = \frac{2\pi}{\lambda_{min}} \sqrt{\frac{\gamma}{m}} a = \pi \sqrt{\frac{\gamma}{m}},$$

в нашем случае константа взаимодействия вместо γ будет Ξ .

5. КОГЕРЕНТНЫЙ ТЕПЛОВОЙ ПОТОК ПРИ КОНЕЧНОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ

Рассмотрим теперь задачу для конечных температур. Здесь необходимо учитывать весь континуум мод во всем спектре разрешенных частот. Спектральная плотность потока тепла с учетом конечной температуры должна учитывать тепловое распределение числа фононов в данной моде (функцию распределения Планка)

$$\begin{aligned} \langle j \rangle_{\omega T} &= \left\langle \frac{d\varepsilon}{d\omega} \right\rangle_T = \\ &= \hbar \omega c_s \frac{g_s \omega^2}{(2\pi)^3 c_s^3} \frac{2\pi}{3} |\alpha(t)|^2 \left(\frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) \approx \\ &\approx \left(t \gg T = \frac{2\pi}{\omega} \right) \approx \hbar \omega \frac{\omega^2}{(2\pi)^2 c_s^2} \left(\frac{2\Lambda_0 T}{\hbar} \right)^2 \times \\ &\times \left\{ \frac{1}{(1 + (\tau\omega)^2)^2} + \frac{e^{-2t/\tau}}{4(1 + (\tau\omega)^2)} \right\} \left(\frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right)_{t \rightarrow \infty} \\ &\xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{\hbar \omega^3}{c_s^2} \left(\frac{2\tau\Lambda_0}{2\pi\hbar} \right)^2 \frac{1}{(1 + (\tau\omega)^2)^2} \left(\frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right). \quad (41) \end{aligned}$$

Зависимости спектральной плотности (41) от частоты представлены на рис. 2.

Для оценки параметров, возьмем выражение (41) в виде

$$\begin{aligned} j_\omega &= \left(\frac{\hbar}{\tau T} \right) (\omega\tau) T \frac{(\tau\omega)^2}{(2\pi)^2 c_s^2} \left(\frac{2\Lambda_0}{\hbar} \right)^2 \times \\ &\times \left\{ \frac{1}{(1 + (\tau\omega)^2)^2} + \frac{e^{-2t/\tau}}{4(1 + (\tau\omega)^2)} \right\} \left(\frac{1}{e^{(\hbar/\tau T)(\tau\omega)} - 1} \right), \end{aligned}$$

$$\tau \sim 10^{-13}, \quad \frac{\hbar}{T} \sim 10^{-14} - 10^{-15}, \quad \frac{\hbar}{\tau T} \sim 0.1 - 0.01.$$

Рассмотрим полный поток с учетом температуры в низкотемпературном пределе, $T \leq \Lambda_0$ (здесь температура записывается в энергетической шкале $T = k_B T^\circ$). При этом следует учесть порядки величин: время когерентности τ определяется характерными временами релаксации электронной системы

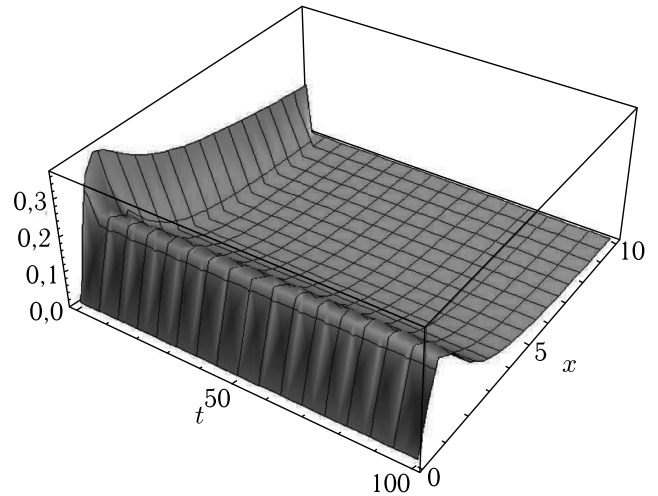


Рис. 2. Спектральная плотность потока с учетом равновесного распределения Планка. Здесь $t = t/\tau$, $x = \omega\tau$. При заданном времени релаксации фононов имеется резонансная частота $\omega^* \sim 3/2\tau$, когда спектральная плотность потока не затухает со временем (сверхтеплопроводимость)

в твердом теле, т. е. $\tau \sim 10^{-13}$ с. Характерный параметр, входящий в функцию распределения Планка,

$$\frac{\hbar}{k_B T^\circ} = \frac{10^{-27}}{1.4 \cdot 10^{-16} T^\circ} = \frac{10^{-11}}{1.4 \cdot T^\circ},$$

в диапазоне температур T° от 300 до 1000 К, меняется:

$$\frac{\hbar}{k_B T^\circ} = \frac{10^{-11}}{1.4 \cdot T^\circ} \sim 10^{-14} - 10^{-15} \text{ с.}$$

Тогда необходимо учесть тот факт, что

$$\tau\omega > \frac{\hbar\omega}{k_B T^\circ},$$

т. е. мы имеем дело с квазиadiaбатическим взаимодействием, когда система может быть описана равновесной функцией распределения Планка. Условие малого градиента означает, что выполняется неравенство $\tau c_s \ll l$, где l — пространственный масштаб изменения температуры. Иными словами, само изменения температуры происходит на сравнительно больших временах, $l/c_s \gg \tau$, таким образом, интегрирование спектральной плотности потока по частоте с учетом температуры можно выполнять как при постоянной температуре:

$$\begin{aligned}
J &= \int_0^{\omega_D} \langle j \rangle_\omega \left(\frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) d\omega = \\
&= \int_0^{\omega_D} \frac{|\alpha(t)|^2}{4\pi^2 c_s^2} \left(\frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) \omega^2 d\omega = \\
&= \hbar \left(\frac{\Lambda_0 \tau}{\hbar \pi c_s} \right)^2 \int_0^{\omega_D} \left\{ \frac{1}{(1 + (\tau\omega)^2)^2} + \frac{e^{-2t/\tau}}{4(1 + (\tau\omega)^2)} \right\} \times \\
&\quad \times \left(\frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) \omega^3 d\omega. \quad (42)
\end{aligned}$$

5.1. Высокотемпературный предел

В случае фононного времени релаксации, $\tau\omega_D > 1$, $\hbar\omega_D/T \sim 1$, имеем

$$\begin{aligned}
\mathbf{J}_{HT} &= \int_0^\infty \frac{\langle j \rangle_\omega}{e^{\hbar\omega/T} - 1} d\omega = \left(\frac{\Lambda_0}{2\pi\hbar} \right)^2 \times \\
&\times \frac{T}{\tau c_s^2} \left[\pi + \frac{1}{2} e^{-2t/\tau} \left\{ (\tau\omega_D)^2 - \ln(1 + (\tau\omega_D)^2) \right\} \right] = \\
&= \frac{3}{2} \frac{n T c_s}{\tau \omega_D} \left(\frac{\Lambda_0}{\hbar \omega_D} \right)^2 \times \\
&\times \left\{ \pi + \frac{e^{-2t/\tau}}{2} \left[(\tau\omega_D)^2 - \ln(1 + (\tau\omega_D)^2) \right] \right\} \quad (43)
\end{aligned}$$

(подробности вычисления см. в Приложении). Фактически мы приходим к классической линейной зависимости от температуры, возникающей в высокотемпературном пределе в макроскопическом кристалле. Однако здесь еще имеется вклад, напрямую связанный с временем когерентности τ , который экспоненциально затухает со временем, что вполне согласуется с выводами в работ [14, 32, 33] для высокотемпературного предела с учетом когерентности фононов.

5.2. Низкотемпературный предел

1. В случае малого времени когерентности, $\tau\omega_D < 1$, $\hbar\omega_D/T \gg 1$, имеем

$$\begin{aligned}
J_{LT\tau} &\approx \int_0^{\omega_D} \langle j \rangle_\omega \left(\frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) d\omega = \\
&= \left(\frac{\tau\Lambda_0}{\pi\hbar} \right)^2 \frac{\hbar}{\tau^4 c_s^2} \int_0^\infty \left(\frac{1}{e^{\hbar\omega\tau/\tau T} - 1} \right) \frac{(\tau\omega)^3}{(1 + (\tau\omega)^2)^2} d(\tau\omega) \approx
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\approx \left(\frac{\tau\Lambda_0}{\pi\hbar} \right)^2 \frac{\hbar}{\tau^4 c_s^2} \left(\frac{\tau T}{\hbar} \right)^4 \zeta_R(4) \Gamma(4) = \\
&= \frac{2}{5} n c_s \frac{(\pi T)^4}{(\hbar\omega_D)^3} \left(\tau\omega_D \frac{\Lambda_0}{\hbar\omega_D} \right)^2, \quad (44) \\
&\zeta_R(4) = \frac{\pi^4}{90}.
\end{aligned}$$

Здесь учтено выражение (39) для скорости звука. Результат получается как для обычных тепловых фононов в отсутствие когерентности, если фактор когерентности $(\tau\Lambda_0/\hbar) \rightarrow 1$.

2. В случае большого времени когерентности, $\omega_D \tau > 1$, $\hbar\omega_D/T \gg 1$, имеем

$$\begin{aligned}
J_{LT\tau} &= \int_0^{\omega_D} \langle j \rangle_\omega \left(\frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) d\omega = \\
&= \hbar \left(\frac{\Lambda_0 \tau}{\hbar \pi c_s} \right)^2 \int_0^\infty \left\{ \frac{1}{(1 + (\tau\omega)^2)^2} + \right. \\
&\quad \left. + \frac{e^{-2t/\tau}}{4(1 + (\tau\omega)^2)} \right\} \left(\frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) \omega^3 d\omega = \\
&= J_{LTI} + J_{LTH}(t). \quad (45)
\end{aligned}$$

Здесь стационарная J_{LTI} и временная $J_{LTH}(t)$ части теплового потока в низкотемпературном пределе имеют вид

$$\begin{aligned}
J_{LTI} &= \left(\frac{\tau\Lambda_0}{\pi\hbar c_s} \right)^2 \frac{\hbar}{2\tau^4} \left(\frac{\tau T}{\hbar} \right)^2 \zeta_R(2), \\
J_{LTH}(t) &\approx \left(\frac{\tau\Lambda_0}{\pi\hbar} \right)^2 \frac{\hbar}{4\tau^4 c_s^2} e^{-2t/\tau} \times \\
&\times \int_0^\infty \left(\frac{1}{e^{\hbar(\tau\omega)/\tau T} - 1} \right) \frac{(\tau\omega)^3}{(\tau\omega)^2} d(\tau\omega) = \quad (46) \\
&= \left(\frac{\Lambda_0}{2\pi\hbar^2 T} \right)^2 \frac{\hbar}{c_s^2} e^{-2t/\tau} \zeta_R(2) \Gamma(2), \\
\zeta_R(2) &= \frac{\pi^2}{6}.
\end{aligned}$$

Полный поток с учетом временной зависимости тогда имеет вид

$$\mathbf{J}_{LT\tau} = \frac{\pi^2}{2} \frac{n c_s T^2}{\hbar \omega_D} \left(\frac{\Lambda_0}{\hbar \omega_D} \right)^2 \left\{ 1 + \frac{e^{-2t/\tau}}{2} \right\}. \quad (47)$$

Рассмотрим соответствующие вклады во внутреннюю энергию и теплоемкость. Для этого вычислим квантово-механическое среднее значение энергии для одной моды с частотой ω :

$$\begin{aligned}
 \langle u \rangle &= \hbar\omega \langle \Psi(t) | \hat{n} | \Psi(t) \rangle = \\
 &= \hbar\omega |\alpha(t)|^2 |C(t)|^2 e^{|\alpha(t)|^2} = \\
 &= \hbar\omega |\alpha(t)|^2, \\
 \langle u \rangle_\omega &= \frac{d\varepsilon}{d\omega} = 4\pi\hbar\omega \frac{g_s\omega^2}{(2\pi)^3 c_s^3} |\alpha(t)|^2 = \quad (48) \\
 &= \hbar\omega \frac{3\omega^2}{2\pi^2 c_s^3} \left(\frac{2\Lambda_0\tau}{\hbar} \right)^2 \left\{ \frac{1}{(1+(\tau\omega)^2)^2} - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{e^{-t/\tau} \cos(\omega t + \arctg(\omega\tau))}{(1+(\tau\omega)^2)^{3/2}} + \frac{e^{-2t/\tau}}{4(1+(\tau\omega)^2)} \right\} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \\
 &\quad \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{6\hbar\omega^3}{c_s^3} \left(\frac{\tau\Lambda_0}{\pi\hbar} \right)^2 \frac{1}{(1+(\tau\omega)^2)^2}.
 \end{aligned}$$

Удельная внутренняя энергия (без учета температуры) в единице объема равна

$$\begin{aligned}
 U &= \int_0^{\omega_D} \langle u \rangle_\omega d\omega = \\
 &= 18 \frac{\Lambda_0^2}{\hbar\omega_D (\tau\omega_D)^2} n \left\{ \left(1 - \frac{e^{-2t/\tau}}{2} \right) \ln(1+(\tau\omega_D)^2) + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{(1+(\tau\omega_D)^2)} - 1 + \frac{e^{-2t/\tau}}{2} (\tau\omega_D)^2 \right\}. \quad (49)
 \end{aligned}$$

С учетом конечной температуры имеем выражение для внутренней энергии в виде

$$\begin{aligned}
 U(T) &= \int_0^{\omega_D} \langle u \rangle_\omega \left(\frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) d\omega = \\
 &= 6 \int_0^{\omega_D} \frac{|\alpha(t)|^2}{4\pi^2 c_s^3} \left(\frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) \omega^2 d\omega = \\
 &= 6 \left(\frac{\tau\Lambda_0}{\pi\hbar} \right)^2 \frac{\hbar}{c_s^3} \int_0^\infty \left(\frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) \times \\
 &\quad \times \left\{ \frac{1}{(1+(\tau\omega)^2)^2} + \frac{e^{-2t/\tau}}{4(1+(\tau\omega)^2)} \right\} \omega^3 d\omega. \quad (50)
 \end{aligned}$$

5.3. Высокотемпературный предел

В случае большого времени когерентности (фононное время релаксации), $\tau\omega_D > 1$, $\hbar\omega_D/T \sim 1$, имеем

$$\begin{aligned}
 \frac{U_{HT}(T)}{V} &= \int_0^{\omega_D} \langle u \rangle_\omega \left(\frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) d\omega = \\
 &= 3nT \frac{3}{\tau\omega_D} \left(\frac{\Lambda_0}{\hbar\omega_D} \right)^2 \times \\
 &\quad \times \left\{ \pi + \frac{e^{-2t/\tau}}{2} [(\tau\omega_D)^2 - \ln(1+(\tau\omega_D)^2)] \right\}. \quad (51) \\
 C_V &= 3N \frac{3}{\tau\omega_D} \left(\frac{\Lambda_0}{\hbar\omega_D} \right)^2 \times \\
 &\quad \times \left\{ \pi + \frac{e^{-2t/\tau}}{2} [(\tau\omega_D)^2 - \ln(1+(\tau\omega_D)^2)] \right\}.
 \end{aligned}$$

Хорошо видно, что теплоемкость в высокотемпературном пределе не зависит от температуры, как и в случае «свободных» фононов в том же пределе, при этом сохраняет специфический вклад, обусловленный константой взаимодействия с электронной подсистемой, и характерный параметр времени когерентности.

5.4. Низкотемпературный предел

1. В случае малого времени когерентности, $\tau\omega_D < 1$, $\hbar\omega_D/T \gg 1$, имеем

$$\begin{aligned}
 \frac{U_{LT\tau}}{V} &\approx \int_0^{\omega_D} \langle u \rangle_\omega \left(\frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) d\omega = 6 \left(\frac{\tau\Lambda_0}{\pi\hbar} \right)^2 \frac{\hbar}{\tau^4 c_s^3} \times \\
 &\quad \times \int_0^\infty \left(\frac{1}{e^{\hbar\omega\tau/\tau T} - 1} \right) \frac{(\tau\omega)^3}{(1+(\tau\omega)^2)^2} d(\tau\omega) \approx \\
 &\quad \approx \left(\frac{\tau\Lambda_0}{\pi\hbar} \right)^2 \frac{6\hbar}{\tau^4 c_s^3} \left(\frac{\tau T}{\hbar} \right)^4 \zeta_R(4) \Gamma(4) = \quad (52) \\
 &= \frac{12}{5} n \frac{(\pi T)^4}{(\hbar\omega_D)^3} \left(\tau\omega_D \frac{\Lambda_0}{\hbar\omega_D} \right)^2, \\
 C_V &= \frac{12}{5} N \pi^4 \frac{T^3}{(\hbar\omega_D)^3} \frac{4}{\pi} \left(\tau \frac{\Lambda_0}{\hbar} \right)^2.
 \end{aligned}$$

Здесь учтено выражение (39) для скорости звука. Для сравнения приведем выражение для теплоемкости кристалла в фононной модели в низкотемпературном пределе:

$$C_V = \frac{4}{5} \pi^4 g_s N \frac{T^3}{(\hbar\omega_D)^3} = \frac{12}{5} \pi^4 N \frac{T^3}{(\hbar\omega_D)^3}.$$

Отсюда следует, что характерная температурная зависимость ($\sim T^3$ — закон Дебая) сохраняется, но при этом появляются дополнительные множители, включающие в себя зависимость от длительности импульса возбуждения τ (время когерентности) и константы поляритон-фоонного взаимодействия. Будучи измеримой величиной, теплоемкость позволит «увидеть» наличие фоонной когерентности.

2. В случае большого времени когерентности, $\omega_D \tau > 1$, $\hbar \omega_D / T \gg 1$, имеем

$$\begin{aligned} U_{LTT} &= \int_0^{\omega_D} \langle u \rangle_\omega \left(\frac{1}{e^{\hbar \omega / T} - 1} \right) d\omega = 6 \frac{\hbar}{c_s} \left(\frac{\Lambda_0 \tau}{\hbar \pi c_s} \right)^2 \times \\ &\times \int_0^\infty \left\{ \frac{1}{(1 + (\tau \omega)^2)^2} + \frac{e^{-2t/\tau}}{4(1 + (\tau \omega)^2)} \right\} \times \\ &\times \left(\frac{1}{e^{\hbar \omega / T} - 1} \right) \omega^3 d\omega = \\ &= \frac{18 n T^2}{\hbar \omega_D} \left(\frac{\Lambda_0}{\hbar \omega_D} \right)^2 \zeta_R(2) \left\{ 1 + \frac{e^{-2t/\tau}}{2} \right\} = \\ &= 3 \pi^2 n \frac{T^2}{\hbar \omega_D} \left(\frac{\Lambda_0}{\hbar \omega_D} \right)^2 \left\{ 1 + \frac{e^{-2t/\tau}}{2} \right\}, \\ C_V &= 6 \pi^2 N \frac{T}{\hbar \omega_D} \left(\frac{\Lambda_0}{\hbar \omega_D} \right)^2 \left\{ 1 + \frac{e^{-2t/\tau}}{2} \right\}. \end{aligned} \quad (53)$$

В случае большой длительности импульса (времени когерентности) когерентные состояния фоонов придают особые отличительные черты тепловой зависимости, а именно теплоемкость решетки приобретает нехарактерную линейную зависимость от температуры, какая возникает у вклада в теплоемкость свободных электронов в металле — вырожденный электронный газ:

$$C_V = \frac{N}{2} \pi^2 \left(\frac{T}{\varepsilon_F} \right).$$

6. РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

В заключении следует отметить, что рассмотренная модель формирования когерентных фоонов в трехмерном кристалле, где предварительно предполагается поляритонная генерация среды лазерным импульсом, носит абстрактный характер и не привязана к конкретному эксперименту. Фиксированным фактом при проведении аналитического расчета являлась размерность системы (кристалла) — 3D, т.е. как электроны, так и фооны могут

свободно распространяться по трем ортогональным осям. Выражение (35) для спектрального потока «молчаливо» подразумевает пересчет от

$$d^3 k \rightarrow \frac{g_s \omega^2}{(2\pi)^3 c_s^3} \frac{2\pi}{3} d\omega.$$

Рассмотрение систем пониженной размерности (квазидвумерный или квазиодномерный кристалл) естественно приведет к изменению выражений как спектральной плотности потока, так и выражений для полных потоков, поскольку связано с изменением плотности микросостояний на интервал энергии. Более подробное рассмотрение влияния изменения размерности системы на характер формирования когерентных состояний фоонов безусловно является самостоятельной проблемой.

Что же касается рассмотренной трехмерной модели образования когерентных фоонов, несмотря на абстрактность постановки, она имеет свое независимое экспериментальное подтверждение. Так, импульсное возбуждение и фазочувствительное обнаружение когерентных фоонов и фоон-поляритонов обеспечивают детальное понимание динамических свойств материи. Эксперименты [33], основанные на методах оптической накачки с фемтосекундным временным разрешением, позволяют одновременно определять амплитуду и фазу когерентного движения решетки. Частоты в терагерцевом диапазоне и времена расфазировки в пикосекундном диапазоне получены с высокой точностью, особенно в полупроводниках и полупроводниковых гетероструктурах, где когерентная фоонная мода и свободные носители возбуждаются одновременно, что несет важную информацию о взаимодействии носителей с фоонами вдали от равновесия.

В статье [33] представлен обзор последних достижений в этой области физики конденсированного состояния. Возбуждение когерентных ЛО-фоонов осуществляется за счет механизма экранирования поля. Два последовательных импульса накачки воздействуют на образец. Их интенсивность и временная задержка регулируются таким образом, чтобы второй импульс обеспечивал движущую силу для когерентной амплитуды, эквивалентной амплитуде, сохраняющейся от первого импульса. Кроме того, начальное поверхностное поле регулируется через прозрачный контакт Шоттки, чтобы не экранировать поверхностное поле полностью уже с первым импульсом. Тщательно регулируя разделение импульсов, движущая сила находится в фазе или в противофазе с первоначально генерируемой коге-

Таблица. Выражения для величины потока энергии в разных моделях

Температура/ Модель	Когерентные состояния	Тепловые фононы	Классическая модель
Низкотемпературный предел $\hbar\omega_D/T \gg 1$	$\tau\omega_D < 1,$ $J_{LT\tau} = \frac{2}{5}nc_s \frac{(\pi T)^4}{(\hbar\omega_D)^3} (\tau\omega_D)^2 \left(\frac{\Lambda_0}{\hbar\omega_D}\right)^2.$ $\omega_D\tau > 1,$ $J_{LT\tau} = 3nc_s \frac{T^2}{\hbar\omega_D} \zeta_R(2) \left(\frac{\Lambda_0}{\hbar\omega_D}\right)^2 \left\{1 + \frac{e^{-2t/\tau}}{2}\right\}$	$J_{LT} = \frac{\pi^4}{10}c_s n \frac{T^4}{(\hbar\omega_D)^3}$	—
Высокотемпературный предел $\hbar\omega_D/T \sim 1$	$J_{HT} = \frac{3}{2\tau\omega_D} nTc_s \left(\frac{\Lambda_0}{\hbar\omega_D}\right)^2 \times$ $\left\{\pi + \frac{e^{-2t/\tau}}{2} [(\tau\omega_D)^2 - \ln(1 + (\tau\omega_D)^2)]\right\}$	$J = \frac{c_s nT}{2}$	$J(x, t) \propto 2kT \frac{x}{t} e^{-t/\tau}$

рентной модой. Таким образом, наблюдается полное разрушение или резонансное усиление когерентных ЛО-фононов. Этот метод позволяет генерировать когерентные ЛО-фононы в течение четко определенного интервала времени, меньшего, чем собственное время дефазировки ЛО-фононов.

Подобные эксперименты проводятся в Sb, где аналогичным образом манипулируют модой А. В смешанных кристаллах BiSb колебания Bi–Bi, Bi–Sb и Sb–Sb можно усиливать и подавлять, применяя последовательности фемтосекундных импульсов. Здесь важно отметить, что во всех указанных экспериментах имеет место общая закономерность, обнаруженная в нашей работе, а именно сам эффект усиления ЛО-фононов с незатухающей теплопроводностью имеет место в различных материалах при выполнении критерия $x = \tau\omega^* \sim 2$, где τ — время когерентности ω^* — частота, на которую приходится максимум спектральной плотности энергии.

В указанной работе $\tau = 0.25$ Пс $= 0.25 \cdot 10^{-12}$ с, $\omega^* = 8.8$ ТГц $= 8.8 \cdot 10^{12}$ Гц, $\tau\omega^* = 2.2$.

Для объемного GaAs $\tau = 0.25$ Пс, $\omega^* \sim 9$ ТГц, $x = \tau\omega^* = 2.25$.

Для GaAs/A_{0.3}Ga_{0.7}As-сверхрешетки $\tau = 0.2$ Пс, $\omega^* = 8.5$ ТГц, $x = \tau\omega^* = 1.7$.

Для изотропного кристалла Те $\omega^* = 3.5$ ТГц, $\tau = 0.6$ Пс, $x = \tau\omega^* = 2.1$,

Для анизотропного кристалла Те $\omega^* = 4.2$ ТГц, $\tau = 0.5$ Пс, $x = \tau\omega^* = 2.1$.

В эксперименте по терагерцевой эмиссии для кристалла InP наблюдается широкий пик при $\omega^* = 1$ ТГц, $\tau = 2$ Пс, $x = \tau\omega^* = 2$.

При исследовании когерентной фононной динамики в монокристалле Те, возбуждаемом усиленными лазерными импульсами СРМ с энергией фотонов 2 эВ, получено $\omega^* = 3.6$ ТГц, $\tau = 0.75$ Пс, $x = \tau\omega^* = 2.7$.

Для ВТСП-материала (YBa₂Cu₃O_{7-x} — тонкая пленка) для моды Ва в плоскости CuO₂ получено $\omega^* = 3.6$ ТГц, $\tau = 0.7$ Пс, $x = \tau\omega^* = 2.52$, а для моды Cu (2) в плоскости CuO₂ имеем $\omega^* = 4.2$ ТГц, $\tau = 0.7$ Пс, $x = \tau\omega^* = 2.8$.

Обобщенные результаты приведены в таблице.

Сравнивая все три модели описания тепловых потоков, можно заметить совпадение в характере временной зависимости, а именно экспоненциальное убывание в классической модели с моделью когерентных фононов в высокотемпературном пределе. Однако в случае когерентных вкладов указанное убывание происходит быстрее в силу коэффициента 2 в показателе временной экспоненты. При этом температурная зависимость в высокотемпературном пределе одинакова во всех трех моделях, а именно линейная по температуре.

В случае предела низких температур классическое рассмотрение смысла не имеет, особенно если речь идет о нанокристаллах или тонких пленках и квантовых шнурах. Фононная модель применима для указанных квантовых пределов, более того, она эффективно описывает случаи достаточно сильного электрон-фононного взаимодействия, обусловленного механизмом поляритонной генерации, но в этом случае совместно решается система «зацепляющихся» нелинейных уравнений, связывающих электронную и колебательную компоненты. В таблице это решение не отражено, подробно см. [5]. В таблице при-

ведены результаты для тепловых свойств свободных фононов. Что же касается временной зависимости потока в низкотемпературном пределе, то предполагаемая в работе [14] временная зависимость гауссового типа в режиме когерентных фононов не возникает, она сохраняет экспоненциальный вид с удвоенным коэффициентом уменьшения ($\sim e^{-2t/\tau}$). Сама когерентность отражается в выражении для потока в виде множителя, содержащего отношение константы поляритон-фононного взаимодействия и энергии Дебая ($\sim (\tau\omega_D)^2 (\Lambda_0/\hbar\omega_D)^2$), а также в случае короткого времени когерентности в виде дополнительного множителя $(\tau\omega_D)^2 < 1$. При этом сама зависимость потока от времени когерентности и константы взаимодействия с электронной подсистемой естественным образом переходит в выражение для теплового потока свободных фононов

$$J_{LT\tau} = \frac{nc_s}{10} \frac{(\pi T)^4}{(\hbar\omega_D)^3} \left\{ (2\tau\omega_D)^2 \left(\frac{\Lambda_0}{\hbar\omega_D} \right)^2 \right\} \rightarrow \\ \rightarrow J_{LT} = \frac{nc_s}{10} \frac{(\pi T)^4}{(\hbar\omega_D)^3},$$

если

$$\left\{ (2\tau\omega_D)^2 \left(\frac{\Lambda_0}{\hbar\omega_D} \right)^2 \right\} \rightarrow 1,$$

т.е. когда в системе имеется некий «резонанс» параметров, время когерентности и константа поляритон-фононного взаимодействия связаны как

$$\left(\frac{2\tau\Lambda_0}{\hbar} \right) \rightarrow 1,$$

что по существу является соотношением неопределенностей (энергия–время)

$$\Lambda_0\tau \geq \left(\frac{\hbar}{2} \right),$$

минимизированным асимптотически именно в результате когерентности состояния колебательной системы. Доказательство утверждения о минимизации соотношения неопределенностей «координата–импульс» когерентными состояниями можно найти в книге [29].

ПРИЛОЖЕНИЕ А. СВОЙСТВА СОСТОЯНИЙ ШРЕДИНГЕРА

1. Линейное преобразование операторов рождения/уничтожения (11) осуществляется оператором унитарного преобразования

$$\hat{U} = e^{\hat{D}},$$

где $\hat{D}$ должен быть эрмитовым оператором, $\hat{D} = \hat{D}^\dagger$. Имеем

$$B = e^{-\hat{D}} \hat{b} e^{\hat{D}} = \hat{b} + \frac{\Lambda_{k\lambda}}{\hbar\omega_k}.$$

Разложение для операторной экспоненты

$$B = \hat{b} + \frac{\Lambda_{k\lambda}}{\hbar\omega_k} = e^{-\hat{D}} \hat{b} e^{\hat{D}} = \\ = \hat{b} + [\hat{b}\hat{D}] + \left[\hat{b} [\hat{b}\hat{D}] \right] + \left[\hat{b} [\hat{b} [\hat{b}\hat{D}]] \right] + \dots$$

Оператор $\hat{D}$ имеет вид

$$\hat{D} = c(\hat{b}^\dagger - \hat{b}),$$

где

$$c = -\frac{\Lambda_{k\lambda}}{\hbar\omega_k},$$

что представляет собой частный случай оператора унитарного преобразования

$$\hat{U}(\alpha) = e^{(\alpha^* \hat{b}^\dagger - \alpha \hat{b})}$$

с вещественной функцией

$$\alpha = -\frac{\Lambda_{k\lambda}}{\hbar\omega_k}.$$

Оно преобразует «старую» функцию вакуума $|n_{k\lambda}\rangle = |0\rangle$ в соответствующий «новый» вакуум, отвечающий состоянию

$$|\nu_{k\lambda} = 0\rangle = |\alpha\rangle = \hat{U}(\alpha) |n_{k\lambda} = 0\rangle = \\ = e^{(\alpha^* \hat{b}^\dagger - \alpha \hat{b})} |n_{k\lambda} = 0\rangle.$$

2. Разложение состояния $|\alpha\rangle$ по полному набору осцилляторных фононных состояний $|n\rangle$ (при аналогичном описании фотонов их называют фоковскими состояниями) имеет вид

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n|\alpha\rangle,$$

$$\alpha \langle n|\alpha\rangle = \langle n|\hat{b}|\alpha\rangle = \langle n|\hat{b}|n+1\rangle \langle n+1|\alpha\rangle = \\ = \sqrt{n+1} \langle n+1|\alpha\rangle,$$

$$\langle n+1|\alpha\rangle = \frac{\alpha}{\sqrt{n+1}} \langle n|\alpha\rangle.$$

Отсюда следует

$$\langle n|\alpha\rangle = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \langle 0|\alpha\rangle.$$

Таким образом,

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n|\alpha\rangle = \langle 0|\alpha\rangle \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}.$$

«Нулевой» коэффициент разложения $\langle 0|\alpha\rangle$ определяется из условия нормировки $|\alpha\rangle$:

$$\begin{aligned}\langle \alpha|\alpha\rangle &= \sum_{n'=0}^{\infty} \langle \alpha|n'\rangle \langle n'|\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n|\alpha\rangle = \\ &= |\langle 0|\alpha\rangle|^2 \sum_{\substack{n=0 \\ n'=0}}^{\infty} \frac{\alpha^{*n'}}{\sqrt{n'!}} \langle n'|n\rangle \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} = \\ &= |\langle 0|\alpha\rangle|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = |\langle 0|\alpha\rangle|^2 e^{|\alpha|^2} = 1,\end{aligned}$$

$$|\langle 0|\alpha\rangle| = e^{-|\alpha|^2/2}.$$

Среднее число фононов в когерентном состоянии равно

$$\begin{aligned}\langle n\rangle &= \langle \alpha|\hat{b}^\dagger \hat{b}|\alpha\rangle = \\ &= e^{-|\alpha|^2} \sum_{\substack{n=0 \\ n'=0}}^{\infty} \frac{\alpha^{*n'}}{\sqrt{n'!}} \langle n'|\hat{b}^\dagger \hat{b}|n\rangle \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} = \\ &= e^{-|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} n \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = |\alpha|^2 e^{-|\alpha|^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2(n-1)}}{(n-1)!} \equiv \\ &\equiv |\alpha|^2 e^{-|\alpha|^2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2k}}{k!} = |\alpha|^2 e^{-|\alpha|^2} e^{|\alpha|^2} = |\alpha|^2.\end{aligned}$$

Когерентное состояние имеет вид

$$|\alpha\rangle = e^{-\langle n\rangle/2} \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \frac{\sqrt{\langle n\rangle}^n}{\sqrt{n!}}.$$

Следовательно, вероятность обнаружить число фононов равное n в заданном когерентном состоянии со средним числом фононов $\langle n\rangle$ подчиняется распределению Пуассона:

$$W_n = e^{-\langle n\rangle} \frac{\langle n\rangle^n}{n!}.$$

3. Унитарный оператор

$$\hat{D}(\alpha) = e^{-\frac{\langle n\rangle}{2}} e^{\alpha^* \hat{b}^\dagger} e^{-\alpha \hat{b}}, \quad \alpha^* = \alpha,$$

обладает следующими свойствами:

- 1) $\hat{D}(\alpha)\hat{D}^\dagger(\alpha) = \hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{D}(\alpha) = 1$,
- 2) $\hat{D}^\dagger(\alpha) = \hat{D}(-\alpha)$,
- 3) $\hat{D}(\beta)\hat{D}(\alpha) = e^{-\frac{\beta\alpha^* - \beta^*\alpha}{2}} \hat{D}(\beta + \alpha) \Rightarrow$
 $\Rightarrow \hat{D}(\beta)\hat{D}(\alpha) = e^{-\beta\alpha^* - \beta^*\alpha} \hat{D}(\alpha)\hat{D}(\beta),$

$$[\hat{b}\hat{D}(\alpha)] = \alpha\hat{D}(\alpha),$$

$$[\hat{b}^\dagger\hat{D}(\alpha)] = \alpha^*\hat{D}(\alpha),$$

$$\hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{b}\hat{D}(\alpha) = \hat{b} + \alpha,$$

$$\hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{b}^\dagger\hat{D}(\alpha) = \hat{b}^\dagger + \alpha^*.$$

4. Рассмотрим свойство полноты и неортогональность. Известно, что когерентные состояния $|\alpha\rangle$ и $|\beta\rangle$, различающиеся средним числом фононов в данной моде $\langle N\rangle \neq \langle K\rangle$, являются неортогональными состояниями:

$$\begin{aligned}\langle \alpha|\beta\rangle &= e^{-\frac{\langle N\rangle + \langle K\rangle}{2}} \sum_{\substack{n=0 \\ n'=0}}^{\infty} \frac{\sqrt{\langle N\rangle}^{n'}}{\sqrt{n'!}} \langle n'|n\rangle \frac{\sqrt{\langle K\rangle}^n}{\sqrt{n!}} = \\ &= \exp\left(-\frac{(\sqrt{\langle K\rangle} - \sqrt{\langle N\rangle})^2}{2}\right), \\ |\langle \alpha|\beta\rangle|^2 &= \exp\left(-(\sqrt{\langle K\rangle} - \sqrt{\langle N\rangle})^2\right).\end{aligned}$$

Между тем, они обладают свойством полноты, которое позволяет по этим состояниям разлагать в ряд произвольный вектор состояния:

$$\begin{aligned}\int |\alpha\rangle \langle \alpha| d^2\alpha &= \int \sum_{\substack{n=0 \\ n'=0}}^{\infty} \frac{\alpha^n \alpha^{*n'}}{\sqrt{n!}\sqrt{n'!}} |n\rangle \langle n'| e^{-|\alpha|^2} d^2\alpha = \\ &= \pi \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|n\rangle \langle n|}{n!} \Gamma(n+1) = \pi \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n|.\end{aligned}$$

Таким образом, свойство полноты может быть записано в виде

$$\frac{1}{\pi} \int |\alpha\rangle \langle \alpha| d^2\alpha = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n| = \hat{1}.$$

5. В работе [29] подробно показано, что когерентные состояния минимизируют соотношение неопределенностей. В координатном представлении, где

$$\begin{aligned}\hat{b}^\dagger &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{Q} + \frac{\hat{P}}{i\omega m} \right), \quad \hat{b} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{Q} - \frac{\hat{P}}{i\omega m} \right), \Rightarrow \\ &\Rightarrow \hat{b}^\dagger - \hat{b} = -\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \frac{\partial}{\partial Q},\end{aligned}$$

указанное когерентное состояние с учетом описанного унитарного преобразования отвечает так называемому осциллятору со смещенным центром:

$$\begin{aligned}
\Psi_\alpha(Q) &= e^{\alpha(\hat{b}^\dagger - \hat{b})} \psi_0(Q) = & &= \frac{\pi}{4} \left(\frac{\Lambda_0}{\pi \hbar} \right)^2 \frac{T}{\tau c_s^2}, \\
&= e^{-\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \alpha \frac{\partial}{\partial Q}} \psi_0(Q) = \psi_0 \left(Q - \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \alpha \right), \\
\Psi_\alpha(Q) &= \psi_0 \left(Q + \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \frac{\Lambda}{\hbar \omega} \right).
\end{aligned}$$

Здесь функции основного состояния гармонического осциллятора с частотой ω обозначены как $\psi_0(Q)$, и когерентного состояния — как

$$\Psi_\alpha(Q) = \Psi_{\langle n \rangle}(Q).$$

ПРИЛОЖЕНИЕ В. ИНТЕГРАЛЫ

1. Рассмотрим высокотемпературный предел $\hbar\omega/T \sim 1$, $\tau\omega \gg 1$, $\Rightarrow \hbar(\omega\tau)/\tau T \sim 1$. Тогда

$$\begin{aligned}
J &= \int_0^{\omega_D} \langle j \rangle_\omega \left(\frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) d\omega = \\
&= \hbar \left(\frac{\Lambda_0 \tau}{\hbar \pi c_s} \right)^2 \int_0^{\omega_D} \left\{ \frac{1}{(1 + (\tau\omega)^2)^2} \frac{e^{-2t/\tau}}{4(1 + (\tau\omega)^2)} \right\} \times \\
&\quad \times \left(\frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) \omega^3 d\omega = \\
&= I + II(t),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I &= \left(\frac{\tau \Lambda_0}{\pi \hbar} \right)^2 \frac{\hbar}{c_s^2} \int_0^\infty \left(\frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) \frac{\omega^3}{(1 + (\tau\omega)^2)^2} d\omega = \\
&= [\tau\omega = x] = \left(\frac{\tau \Lambda_0}{\pi \hbar} \right)^2 \times \\
&\quad \times \frac{\hbar}{\tau^4 c_s^2} \int_0^\infty \left(\frac{1}{e^{\hbar x/\tau T} - 1} \right) \frac{(x)^3}{(1 + x^2)^2} dx \approx \\
&\quad \approx \left[x > 1, \frac{\hbar x}{\tau T} < 1 \right] \approx \\
&\quad \approx \left(\frac{\tau \Lambda_0}{\pi \hbar} \right)^2 \frac{\hbar}{\tau^4 c_s^2} \frac{T\tau}{\hbar} \int_0^\infty \frac{x^2}{(1 + x^2)^2} dx = \\
&= \left(\frac{\tau \Lambda_0}{\pi \hbar} \right)^2 \frac{\hbar}{\tau^4 c_s^2} \frac{T\tau}{\hbar} \left\{ -\frac{x}{(1 + x^2)} + \frac{1}{2} \operatorname{arctg} x \right\}_0^\infty =
\end{aligned}$$

$$\times \int_0^{\omega_D} \left(\frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) \frac{\omega^3}{(1 + (\tau\omega)^2)} d\omega =$$

$$= \left(\frac{\Lambda_0}{\pi \hbar} \right)^2 \frac{\hbar}{4\tau^2 c_s^2} e^{-2t/\tau} \times$$

$$\times \int_0^{\tau\omega_D} \left(\frac{1}{e^{\hbar x/\tau T} - 1} \right) \frac{x^3}{(1 + x^2)} dx \approx$$

$$\approx \left[\tau\omega = x > 1, \frac{\hbar x}{\tau T} < 1 \right] \approx \left(\frac{\Lambda_0}{\pi \hbar} \right)^2 \frac{\hbar}{4\tau^2 c_s^2} e^{-2t/\tau} \times$$

$$\begin{aligned}
&\times \int_0^{\tau\omega_D} \left(\frac{1}{1 + \frac{\hbar x}{\tau T} - 1} \right) \frac{x^3}{(1 + x^2)} dx = \\
&= \left(\frac{\Lambda_0}{2\pi \hbar} \right)^2 \frac{T}{2\tau c_s^2} e^{-2t/\tau} \left\{ (\tau\omega_D)^2 - \ln(1 + (\tau\omega_D)^2) \right\}.
\end{aligned}$$

2. Рассмотрим внутреннюю энергию и поток энергии кристаллической решетки для свободных фононов. Для сравнения приведем известные выражения для плотности потока и внутренней энергии для свободных тепловых фононов:

$$\begin{aligned}
J &= \frac{2\pi}{3} \frac{g_s c_s}{(2\pi c_s)^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \omega^2 d\omega = \\
&= \frac{2\pi}{3} \frac{g_s c_s}{(2\pi \hbar c_s)^3} T^4 \int_0^{\Theta_D} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \\
&= \frac{g_s c_s}{2(\hbar\omega_D)^3} n T^4 \int_0^{\Theta_D} \frac{x^3}{e^x - 1} dx,
\end{aligned}$$

$$\Theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{T}.$$

В низкотемпературном пределе, $\hbar\omega/T = \Theta_D \gg 1$, имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= c_s n \frac{g_s \mathbf{e}_z T^4}{2(\hbar\omega_D)^3} \int_0^{\Theta_D} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \\ &= c_s n \frac{g_s \mathbf{e}_z T^4}{2(\hbar\omega_D)^3} \int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \\ &= c_s n \frac{g_s \mathbf{e}_z T^4}{2(\hbar\omega_D)^3} T^4 \Gamma(4) \zeta_R(4) = c_s n \frac{\pi^4 T^4}{10(\hbar\omega_D)^3} \mathbf{e}_z, \\ U &= \frac{3Ng_s}{(\hbar\omega_D)^3} T^4 \int_0^{\Theta_D} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \\ &= \frac{3Ng_s}{(\hbar\omega_D)^3} T^4 \int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \\ &= \frac{3Ng_s}{(\hbar\omega_D)^3} T^4 \Gamma(4) \zeta_R(4) = \frac{\pi^4}{5} g_s N \frac{T^4}{(\hbar\omega_D)^3}, \\ C_V &= \frac{12}{5} \pi^4 N \frac{T^3}{(\hbar\omega_D)^3}, \quad g_s = 3. \end{aligned}$$

Таким образом, мы получили закон Дебая: $C \propto T^3$.

В высокотемпературном пределе, $\hbar\omega/T = \Theta_D \leq 1$, имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= c_s n \frac{g_s \mathbf{e}_z T^4}{2(\hbar\omega_D)^3} \int_0^{\Theta_D} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \\ &= c_s n \frac{g_s \mathbf{e}_z T^4}{2(\hbar\omega_D)^3} \int_0^{\Theta_D} \frac{x^3}{1 + x - 1} dx = \\ &= c_s n \frac{g_s \mathbf{e}_z T^4 \Theta_D^3}{6(\hbar\omega_D)^3} = c_s n \frac{g_s \mathbf{e}_z T}{6} = \frac{c_s n T}{2} \mathbf{e}_z, \\ U &= \frac{3Ng_s}{(\hbar\omega_D)^3} T^4 \int_0^{\Theta_D} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = Ng_s T = 3NT, \\ C_V &= 3N. \end{aligned}$$

Таким образом, мы получили закон Дюлонга – Пти.

ПРИЛОЖЕНИЕ С

Рассмотрим классическую задачу теплопроводности для полубесконечной среды с граничными

условиями третьего рода. Для внутренней энергии

$$u = \alpha N k_B T,$$

где $N = nV$ — полное число частиц в системе, α — численный множитель (т.е. $\alpha \propto k_B T$), имеет место уравнение теплопроводности

$$\dot{u} - \kappa u'' = f(x, t)$$

с граничными и начальными условиями

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=0} = 0, \quad \left(\frac{\partial u}{\partial x} + hu \right)_{x=l} = 0,$$

$$u(x, 0) = \varphi(x) = 0,$$

$$f(x, t) = \frac{\Psi(x, t)}{C_p n} = e^{-\alpha t} f_0 \begin{cases} 1, & x \leq x_0, \\ 0, & x > x_0, \end{cases}$$

$$f_0 = \frac{\Psi_0}{C_p n},$$

$$\dot{u} - \kappa u'' = 0, \quad u = X(x)T(t),$$

$$\Rightarrow \frac{\dot{T}(t)}{\kappa T(t)} = \frac{X''(x)}{X(x)} = -\lambda.$$

Здесь $\kappa = K/C_p n$ — коэффициент «температуропроводности», C_p — безразмерная теплоемкость, K [(см·с)⁻¹] — коэффициент теплопроводности, n — концентрация. Получаем

$$\begin{aligned} u(x, t) &= \sum_n \frac{2}{\gamma_n} \cos\left(\frac{\gamma_n}{l} x\right) \sin\left(\frac{\gamma_n}{l} x_0\right) \times \\ &\times \frac{1 - \exp\left(-t\left(\kappa\left(\frac{\gamma_n}{l}\right)^2 - \frac{1}{\tau}\right)\right)}{\kappa\left(\frac{\gamma_n}{l}\right)^2 - \frac{1}{\tau}} e^{-\frac{t}{\tau}}, \end{aligned}$$

где γ_n — решение трансцендентного уравнения

$$\operatorname{tg} \gamma = \frac{hl}{\gamma} \Rightarrow \gamma_n = b_n l.$$

Плотность потока тепла равна

$$\begin{aligned} \mathbf{J}(x, t) &= -K \mathbf{e}_x \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} = \\ &= \mathbf{e}_x \frac{2\kappa\tau}{l} \Psi_0 \sum_n \sin\left(\frac{\gamma_n}{l} x\right) \sin\left(\frac{\gamma_n}{l} x_0\right) \times \\ &\times \frac{1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\left(\kappa\tau\left(\frac{\gamma_n}{l}\right)^2 - 1\right)\right)}{\kappa\tau\left(\frac{\gamma_n}{l}\right)^2 - 1} e^{-\frac{t}{\tau}}. \end{aligned}$$

С учетом того, что решения

$$\gamma_n \rightarrow \frac{\pi}{2}(2n+1),$$

плотность потока энергии будет равна

$$\begin{aligned} \mathbf{J}(x, t) \rightarrow \mathbf{e}_x \frac{2\kappa\tau}{l} \Psi_0 \times \\ \times \sum_n \sin\left(\frac{\pi}{2}(2n+1)\frac{x}{l}\right) \sin\left(\frac{\pi}{2}(2n+1)\frac{x_0}{l}\right) \times \\ \times \frac{1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\left(\kappa\tau\left(\frac{\pi}{2}\frac{(2n+1)}{l}\right)^2 - 1\right)\right)}{\kappa\tau\left(\frac{\pi}{2}\frac{(2n+1)}{l}\right)^2 - 1} e^{-\frac{t}{\tau}}. \end{aligned}$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Suixuan Li, Zihao Qin, Huan Wu, Man Li, M. Kunz, A. Alatas, A. Kavner, and Yongjie Hu, *Anomalous Thermal Transport under High Pressure in Boron Arsenide*, Nature, [www.nature.comhttps://doi.org/10.1038/s41586-022-05381-x](https://doi.org/10.1038/s41586-022-05381-x).
2. S. Lepri, R. Livi, and A. Politi, Phys. Rev. Lett. **125**, 040604 (2020).
3. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика, Теоретическая физика*, том 5, Наука, Физматлит, Москва (1964).
4. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Статистическая физика. Теория конденсированного состояния, Теоретическая физика*, том 9, Наука, Физматлит, Москва (1978).
5. А. В. Юлин, А. В. Пошакинский, А. Н. Поддубный, ЖЭТФ **161**, 206 (2022), doi: 10.31857/S0044451022020067.
6. P. Cipriani, S. Denisov, and A. Politi, Phys. Rev. Lett. **94**, 244301 (2005).
7. C. B. Mendland H. Spohn, Phys. Rev. Lett. **111**, 230601 (2013).
8. A. Dhar, A. Kundu, and A. Kundu, Front. Phys. **7**, 159 (2019).
9. H. Spohn, J. Stat. Phys. **124**, 1041 (2006).
10. A. Mielke, Arch. Ration. Mech. Anal. **181**, 401 (2006).
11. J. Lukkarinen, *Kinetic Theory of Phonons in Weakly Anharmonic Particle Chains*, Springer (2016), p. 159.
12. M. N. Luckyanova, J. Garg, K. Esfarjani, A. Jandl, M. T. Bulsara, A. J. Schmidt, A. J. Minnich, S. Chen, M. S. Dresselhaus, and Z. Ren, Science **338**, 936 (2012).
13. J. Ravichandran, A. K. Yadav, R. Cheaito, P. B. Rossen, A. Soukiassian, S. Suresha, J. C. Duda, B. M. Foley, C.-H. Lee, and Y. Zhu, Nat. Mater. **13**, 168 (2014).
14. Z. Zhang, Y. Guo, M. Bescond, J. Chen, M. Nomura, and S. Volz, Heat Conduction Theory Including Phonon Coherence, APL Mater. **9**, 081102 (2021).
15. M. Simoncelli, N. Marzari, and F. Mauri, Nat. Phys. **15**, 809 (2019).
16. L. Isaeva, G. Barbalinardo, D. Donadio, and S. Baroni, Nat. Commun. **10**, 3853 (2019).
17. Z. Zhang, Y. Guo, M. Bescond, J. Chen, M. Nomura, and S. Volz, Phys. Rev. B **103**, 184307 (2021).
18. S. Hu, Z. Zhang, P. Jiang, J. Chen, S. Volz, M. Nomura, and B. Li, J. Phys. Chem. Lett. **9**, 3959 (2018).
19. M. Först, H. Kurz, T. Dekorsy, and R. P. Leavitt, Phys. Rev. B **67**, 8, 085305 (2003).
20. P. Delsing, A. N. Cleland, M. J. A. Schuetz et al., J. Phys. D **52**, 353001 (2019).
21. S. Hu, Z. Zhang, P. Jiang, J. Chen, S. Volz, M. Nomura, and B. Li, J. Phys. Chem. Lett. **9**, 3959 (2018).
22. L. Lindsay, D. A. Broido, and T. L. Reinecke, Phys. Rev. Lett. **111**, 25901 (2013).
23. J. S. Kang, M. Li, H. Wu, H. Nguyen, and Y. Hu, Science **361**, 575 (2018).
24. S. Li et al., Science **361**, 579 (2018).
25. F. Tian et al., Science **361**, 582 (2018).
26. J. S. Kang et al., Nat. Electron **4**, 416 (2021).
27. Y. Cui, Z. Qin, H. Wu, M. Li, and Y. Hu, Nat. Commun. **12**, 1284 (2021).

28. А. Анималу, *Квантовая теория кристаллических твердых тел*, Мир, Москва (1981), (Alexander O. E. Animalu, *Intermediate Quantum Theory of Crystalline Solids*, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey (1977).
29. А. Н. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике*, Наука, Физматлит, Москва (1971).
30. E. V. Orlenko and V. K. Khersonsky, *Emission and Absorption of Photons in Quantum Transitions. Coherent States*, in: *Quantum Science: The Frontier of Physics and Chemistry*, ed. by T. Onishi, Springer, Singapore (2022), p. 349, https://doi.org/10.1007/978-981-19-4421-5_6.
31. R. Berman, F. E. Simon, and J. Wilks, *Nature* **42se**, 277 (1951).
32. S. Hunsche, K. Wieneke, T. Dekorst, and H. Kurz, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1815 (1995).
33. T. Dekorsy, G.C. Cho, and H. Kurz, *Coherent Phonons in Condensed Media*, in: *Light Scattering in Solids VIII. Topics in Applied Physics*, ed. by M. Cardona and G. Güntherodt, Vol 76, Springer, Berlin, Heidelberg (2000), <https://doi.org/10.1007/BFb0084242>.

ДИФФУЗИЯ АТОМОВ ВОДОРОДА ИЗ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОДЛОЖЕК Si_3N_4 В АМОРФНЫЕ И ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ ПЛЕНКИ Si И Ge

Л. В. Арапкина*, К. В. Чиж, Д. Б. Ставровский, В. П. Дубков, М. С. Сторожевых,
В. А. Юрьев

Институт общей физики им. А. М. Прохорова Российской академии наук
119991, Москва, Россия

Поступила в редакцию 28 июля 2023 г.,
после переработки 28 сентября 2023 г.
Принята к публикации 29 сентября 2023 г.

Методами дифракция быстрых отраженных электронов и ИК-спектроскопии изучены поликристаллические и аморфные пленки Si и Ge, выращенные на диэлектрических подложках $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}(001)$. В ИК-спектрах наблюдается уменьшение интенсивности N–H-полос поглощения в слоях Si_3N_4 , связанное с переходом атомов водорода в растущие пленки Si и Ge. Этот процесс начинается уже при температуре роста пленки 30°C и усиливается с увеличением температуры роста (30–500°C) и толщины пленок Si и Ge (50–200 нм). Рассмотрена модель, основанная на предположении, что переход атомов водорода из диэлектрического слоя Si_3N_4 в растущую пленку Si или Ge контролируется разницей в положении уровней химического потенциала атомов водорода в них и не связан с термодиффузией. Процесс происходит только во время роста слоев Si и Ge и прекращается с его остановкой и с выравниванием уровней химического потенциала.

DOI: 10.31857/S0044451024050043

1. ВВЕДЕНИЕ

Нитрид кремния (Si_3N_4) широко используется в микро- и оптоэлектронике в качестве диэлектрических слоев, просветляющих покрытий и пассивирующих слоев солнечных элементов [1–4]. Несмотря на то, что основным методом его получения служит плазмохимическое осаждение из газовой фазы (plasma-enhanced chemical vapor deposition, PECVD) при низкой температуре (менее 450°C), слои Si_3N_4 , получаемые методом химического осаждения из газовой фазы при низком давлении (low-pressure chemical vapor deposition, LPCVD) и при высокой температуре (700–850°C), имеют некоторые преимущества. Пленки Si_3N_4 , осажденные методом LPCVD, имеют близкий к стехиометрическо-

му состав и низкое содержание атомов водорода, что улучшает их электрические свойства и термическую стабильность по сравнению с пленками Si_3N_4 , полученными методом PECVD. Защитные покрытия из $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{Si}$, нанесенные низкотемпературными методами, широко используются как источник атомов водорода для предотвращения деградации электрофизических свойств монокристаллического (с-Si), мульткристаллического (mc-Si) и аморфного (α -Si) кремния [2–5]. Атомы водорода способны диффундировать из слоя Si_3N_4 и пассивировать на границе раздела оборванные связи атомов Si, тем самым улучшая электрофизические свойства материала [4, 5].

Исследования процессов диффузии атомов водорода в нижележащие слои SiO_2 или Si показали, что атомы водорода не диффундируют сколько-нибудь заметно через границу $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2$, и лишь увеличение температуры отжига до 1000°C приводит к небольшому увеличению содержания атомов водорода в SiO_2 , но только в том случае, ес-

* E-mail: arapkina@kapella.gpi.ru

ли слой Si_3N_4 наносился методом PECVD [6]. Отжиг структур $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{c-Si}$ в интервале температур 500–1000°C не приводит к увеличению концентрации атомов водорода в слое c-Si [7, 8]. Исследования возможной диффузии атомов водорода через границу $\text{Si}_3\text{N}_4/\alpha\text{-Si}$ или mc-Si проводились с целью улучшения электрофизических параметров, например, солнечных элементов, которые имеют защитное покрытие Si_3N_4 . Изучение таких структур затруднено тем, что слои Si_3N_4 , $\alpha\text{-Si}$ или mc-Si гидрогенизированы. В настоящее время процесс диффузии атомов водорода изучен в слоях поликристаллического и аморфного Si [9], полученных методами плазмохимического осаждения. В таких пленках содержание атомов водорода может достигать 25% [7]. Другой часто используемый метод получения гидрогенизированных пленок — имплантация атомов водорода в них. Установлено, что энергия активации диффузии атомов водорода равна примерно 1.5 эВ [9–11], что превышает энергию связи Si–H, составляющую примерно 3 эВ [12]. Предлагаемый механизм диффузии — движение по межузельным состояниям [9, 10, 13–16]. Скорость диффузии зависит от концентрации атомов водорода, температуры и типа легирования слоя Si.

В представленной работе приведены результаты исследования процесса диффузии атомов водорода из слоя Si_3N_4 подложки $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}(001)$, полученного методом LPCVD, в растущую пленку поликристаллических (poly-) или аморфных (α -) слоев Si и Ge. Такие подложки обычно используются при изготовлении фотоприемных структур [17]. В слоях Si_3N_4 , осажденных в процессе LPCVD, содержание атомов водорода может достигать до 8% [7, 18, 19]. В наших предыдущих работах [17, 20–22] были представлены результаты исследования процесса диффузии атомов водорода из диэлектрических слоев (Si_3N_4 и SiO_2) в растущие пленки poly- и α -Si и Ge для широкого интервала температур роста (30–650°C). Было показано, что процесс диффузии происходит уже при температуре роста 30°C, т. е. при отсутствии ее термического стимулирования.

В настоящей работе представлены результаты исследования диффузии атомов водорода в пленки poly- и α -Si и Ge разной толщины. Показано, что диффузия атомов водорода зависит от толщины наносимых слоев Si и Ge. Рассмотрена модель этого процесса, учитывающая температуру осаждения пленки и ее толщину. Исследования проводились методами дифракции быстрых отраженных электронов (ДБОЭ) и инфракрасной фурье-спектроскопии (ИК-спектроскопия).

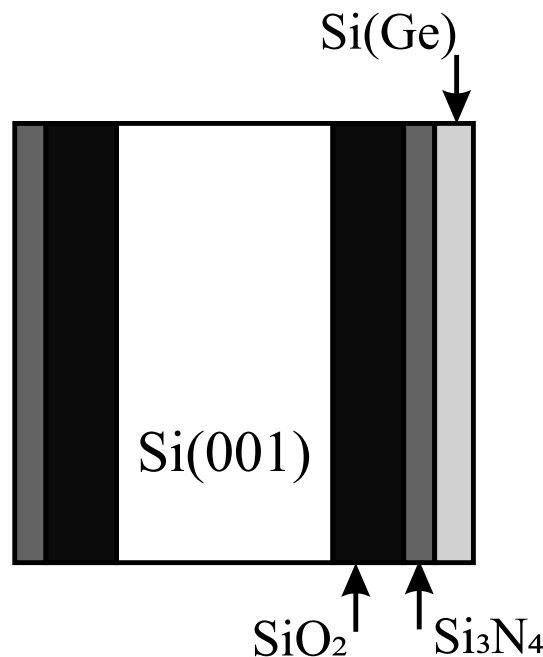


Рис. 1. Схема расположения слоев в исследуемых образцах

2. ЭКСПЕРИМЕНТ

Для исследования были изготовлены образцы с тонкими пленками Si или Ge, нанесенными методом молекулярно-лучевого осаждения на подложки $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}(001)$. Слои SiO_2 толщиной 530 нм наносились методом термического окисления, слой Si_3N_4 толщиной 170 нм — методом LPCVD при температуре 750°C. Температуры процессов изготовления диэлектрических слоев Si_3N_4 и SiO_2 превышали температуры роста слоев Si и Ge. Более подробная информация о методах и режимах изготовления диэлектрических слоев подложек и предварительной химической подготовки представлена в работах [20, 21]. После переноса образцов в условия сверхвысокого вакуума проводилась предварительная термообработка подложек при 600°C, длившаяся 6 ч. Слои Si и Ge наносили в ростовой камере EVA 32 сверхвысоковакуумного комплекса Riber SSC2 с использованием источников с электронно-лучевым нагревом. Температуры роста слоев α - и poly-Si и Ge разной толщины (50, 100, 200 нм) составляли 30 и 500°C. Образцы с толщиной слоев 50 и 100 нм, выращенные при 500°C, после перекрытия потока атомов Si (Ge) выдерживали при температуре роста, чтобы общая длительность процесса у всех образцов была одинаковой. Скорости напыления пленок Si и Ge составляли примерно 0.3 Å/с.

На рис. 1 представлена схема расположения слоев в исследуемых образцах. Более подробно о деталях процесса роста и методах контроля мож-

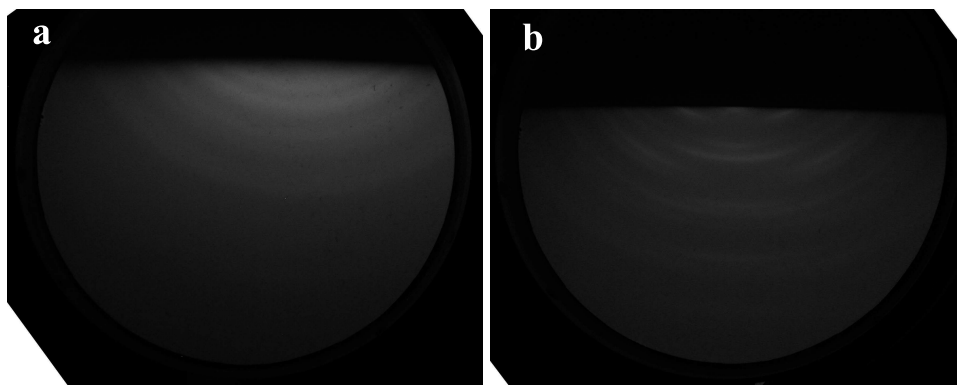


Рис. 2. Картинки дифракции поверхности поликристаллического слоя Si толщиной 20 Å (*a*) и 200 нм (*b*)

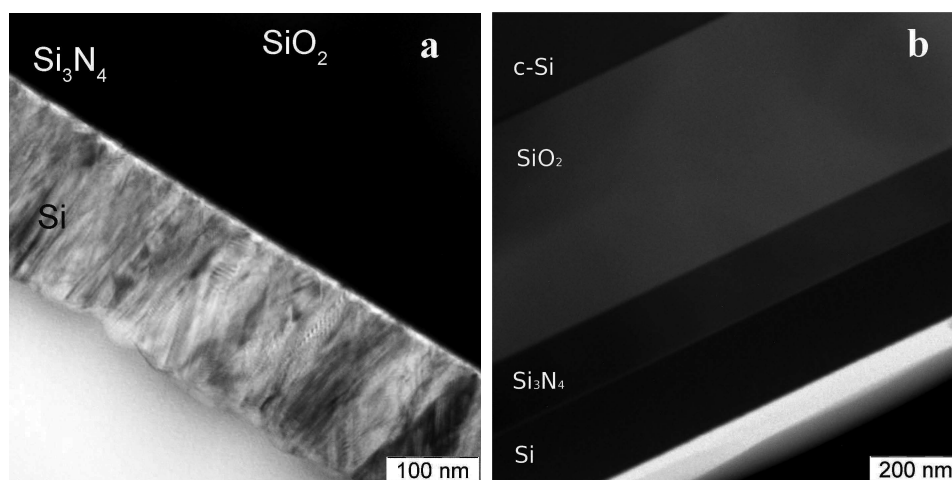


Рис. 3. ПЭМ-изображения поликристаллической (*a*) и аморфной (*b*) пленок Si. Подложка расположена в верхней части изображения

но узнать в работах [20, 21]. Основными методами исследования являлись ДБОЭ, проводимая *in situ* при помощи электронной пушки RH20 RHEED (Staib Instruments), и ИК-спектроскопия. Спектры ИК-пропускания и ИК-отражения измеряли с помощью спектрометра IFS-66v/S (Bruker) в интервале $400\text{--}4600\text{ см}^{-1}$ со спектральным разрешением 10 см^{-1} [20, 21]. Для уменьшения влияния углекислого газа и паров воды спектрометр откачивали до давления 2 мбар. Полосы ИК-поглощения раскладывали на спектральные компоненты; при деконволюции использовали пики с гауссовым профилем.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

Согласно выполненному *in situ* исследованию методом ДБОЭ, все пленки Si и Ge, выращенные при 500°C , имеют поликристаллическую структуру, а при 30°C — аморфную. На начальных этапах роста поликристаллических пленок дифракционные картины состояли из непрерывных широких колец

(рис. 2*a*), но по мере увеличения толщины растущего слоя кольца сужались и в них появлялись разрывы (рис. 2*b*). Таким образом, поликристаллическая пленка на начальном этапе роста формировалась из зерен небольшого размера без упорядочения по направлению роста. Затем происходило постепенное укрупнение размеров зерен и появлялось некоторое выделенное направление роста. Изображения аморфной и поликристаллических пленок Si, полученные методом просвечивающей электронной микроскопии, представлены на рис. 3. Поликристаллическая пленка Si (рис. 3*a*) имеет структуру в виде колоннообразных зерен, начинающихся на границе раздела с диэлектрическим слоем Si_3N_4 , и увеличивающих свой латеральный размер по мере увеличения толщины растущей пленки, что характерно для роста поликристаллических пленок при температурах, обеспечивающих быструю диффузию атомов Si по ростовой поверхности. Область поликристаллической пленки Si, примыкающая к границе раздела

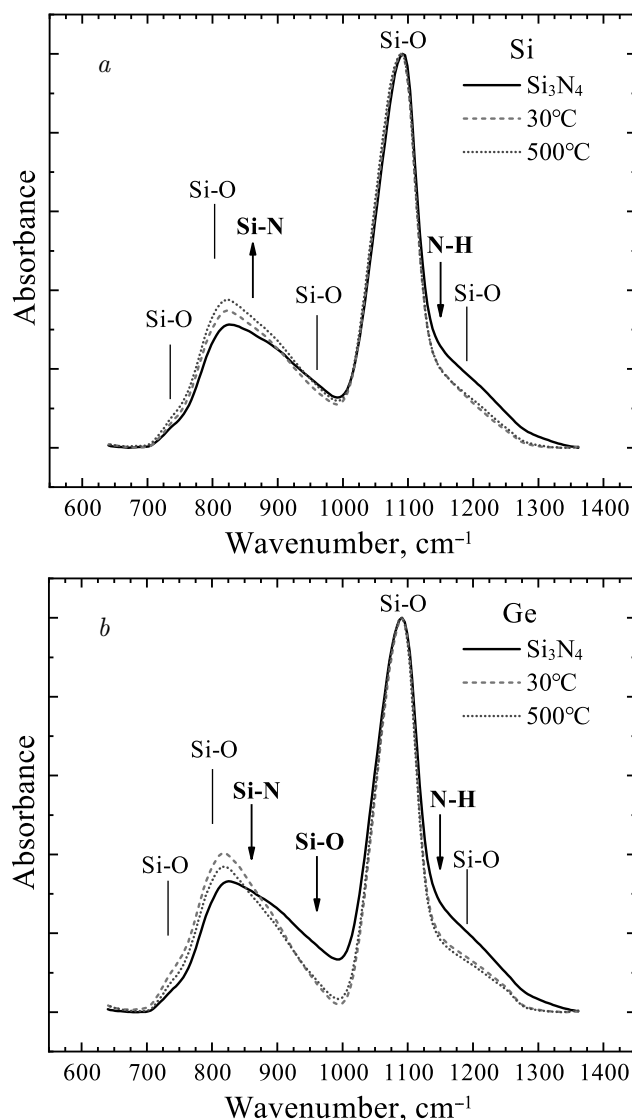


Рис. 4. (В цвете онлайн) Спектры поглощения ИК-излучения слоями Si (a) и Ge (b) толщиной 200 нм, выращенными при 30 и 500°C на подложках $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}(001)$; спектры нормированы на максимум интенсивности полосы поглощения Si-O ($\sim 1100 \text{ см}^{-1}$); спектр подложки обозначен как Si_3N_4

с подложкой, имеет наибольшее количество дефектов. На рис. 3b изображена структура с аморфным слоем Si, выращенным при 30°C в условиях медленной диффузии атомов по поверхности роста.

Исследование ИК-спектров показало, что в исходной подложке $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}(001)$ основные полосы поглощения связаны с колебаниями связей Si-O, Si-N и N-H. Предварительная термообработка подложек при 600°C в течение 6 ч не приводила ни к каким изменениям в спектрах. На рис. 4 представлены спектры ИК-поглощения в спектральном диапазоне $400\text{--}1300 \text{ см}^{-1}$ для структур со слоями Si и Ge, выращенными при 30 и 500°C. Для

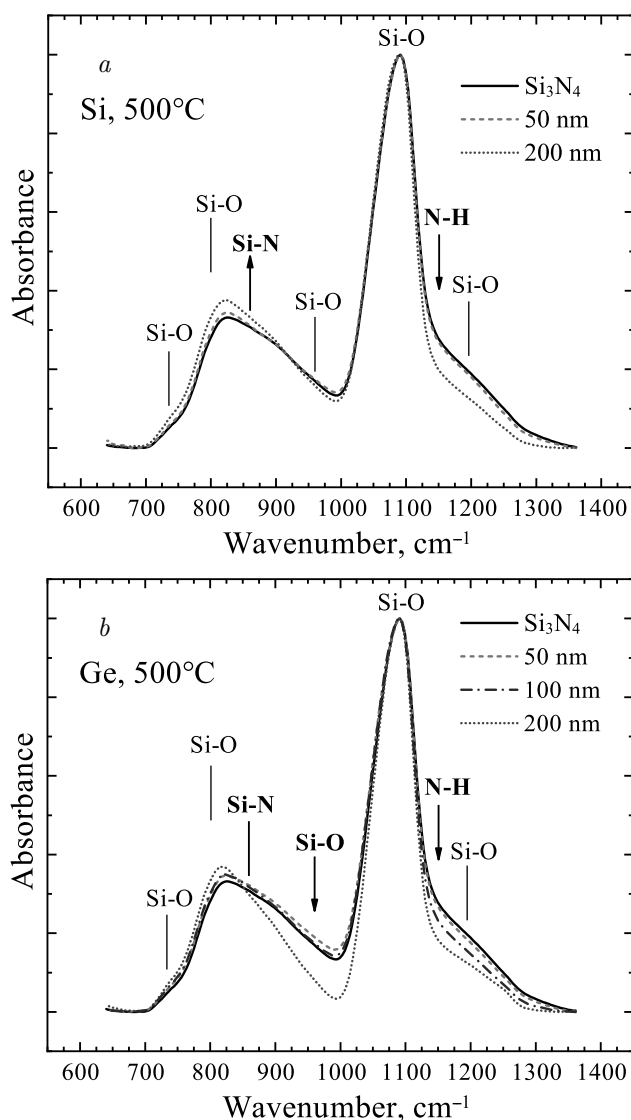


Рис. 5. (В цвете онлайн) Спектры поглощения ИК-излучения слоями Si (a) и Ge (b) разной толщины (50, 100, 200 нм), выращенными при 500°C на подложке $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}(001)$; спектры нормированы на максимум интенсивности полосы поглощения Si-O ($\sim 1100 \text{ см}^{-1}$); спектр подложки обозначен как Si_3N_4

всех спектров характерным является наличие двух широких полос поглощения около 825 и 1090 см^{-1} , связанных с колебаниями связей Si-O в подложке $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}(001)$ [23]. Деконволюция ИК-спектров показала, что можно выделить полосы поглощения, относящиеся к колебаниям связей Si-O ($\sim 735, 805, 1075, 1100, 1190 \text{ см}^{-1}$), Si-N ($\sim 860 \text{ см}^{-1}$) и N-H ($\sim 1150 \text{ см}^{-1}$) в подложке $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}(001)$ [23, 24] и колебаниям связей Si-O в слое оксинитрида ($\sim 960 \text{ см}^{-1}$), расположенном на поверхности Si_3N_4 [21]. Основные изменения в спектрах связаны с полосами поглощения Si-N ($\sim 860 \text{ см}^{-1}$), N-H ($\sim 1150 \text{ см}^{-1}$) и Si-O ($\sim 960 \text{ см}^{-1}$) (выделены жир-

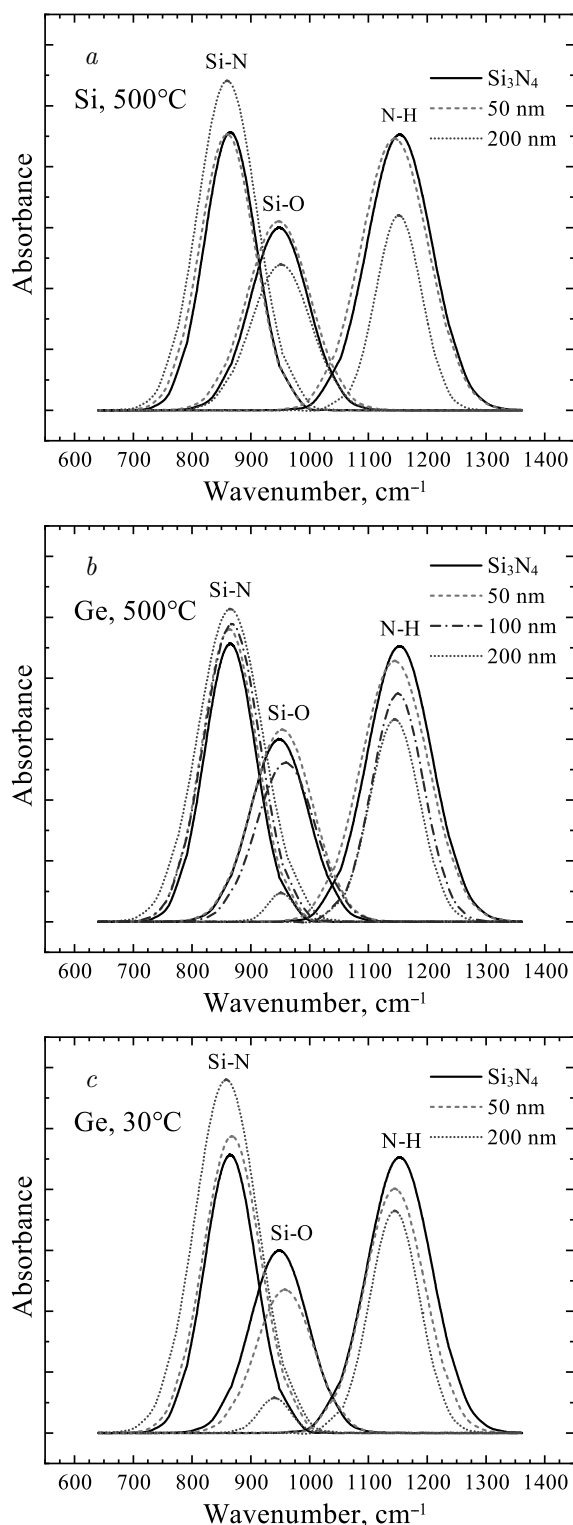


Рис. 6. (В цвете онлайн) Изменение интенсивности полос поглощения, связанных с колебаниями связей Si-N ($\sim 860 \text{ cm}^{-1}$), N-H ($\sim 1150 \text{ cm}^{-1}$) и Si-O ($\sim 960 \text{ cm}^{-1}$) в результате нанесения слоев poly-Si (a) poly-Ge (b) и α -Ge (c) на подложки $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}(001)$; спектр подложки обозначен как Si_3N_4

ным шрифтом на рис. 4). Нанесение пленок Si и Ge по-разному влияет на изменение интенсивности этих полос. В структурах со слоями Si с увеличением температуры роста увеличивается интенсивность полосы Si-N, а интенсивность полосы N-H уменьшается. В структурах же со слоями Ge с увеличением температуры роста интенсивность полос поглощения Si-N, N-H и Si-O падает (рис. 4).

На рис. 5 представлены спектры ИК-поглощения структур со слоями poly-Si и poly-Ge разной толщины, выращенными при 500°C. Изменения в интенсивности полос поглощения, связанных с колебаниями связей Si-N ($\sim 860 \text{ cm}^{-1}$), N-H ($\sim 1150 \text{ cm}^{-1}$) и Si-O ($\sim 960 \text{ cm}^{-1}$) (выделены жирным шрифтом на рис. 5), усиливаются с возрастанием толщины слоев. Основные различия между структурами со слоями Si и Ge связаны с изменениями интенсивности полос поглощения Si-N и Si-O. На образцах с poly-Si с увеличением толщины пленок наблюдается уменьшение интенсивности полос поглощения N-H и увеличение интенсивности полос поглощения Si-N (рис. 5a), что соответствует результату, представленному на рис. 4a. Для структур с poly-Ge добавляется уменьшение интенсивности полосы поглощения Si-O; кроме того, на этих образцах нельзя однозначно определить, изменяется ли интенсивность полосы Si-N (рис. 5b). На рис. 6 показано изменение интенсивности полос поглощения Si-N, N-H и Si-O, полученных в результате деконволюции спектров, представленных на рис. 5, и спектров для структур с α -Ge. В структурах с poly-Si и poly-Ge с увеличением толщины наносимых пленок интенсивность полосы N-H ($\sim 1150 \text{ cm}^{-1}$) уменьшается. Интенсивность полосы поглощения Si-O ($\sim 960 \text{ cm}^{-1}$) значительно уменьшается только в случае структур со слоями Ge. Поглощение в полосе Si-N ($\sim 860 \text{ cm}^{-1}$) в образцах со слоями Si возрастает сильнее, чем в образцах со слоями Ge. Сравнение структур с α -Ge и poly-Ge показывает, что при низкотемпературном росте (30°C) интенсивность полосы поглощения Si-N ($\sim 860 \text{ cm}^{-1}$) увеличивается сильнее, чем при высокотемпературном росте (500°C).

4. ОБСУЖДЕНИЕ

Для объяснения наблюдаемых результатов мы используем модель диффузии атомов водорода, предложенную в работах [9, 10, 13–16] для аморфных пленок Si и Ge. Температурные режимы роста слоев Si и Ge не являются благоприятными для термической диффузии атомов водорода. Энергия активации диффузии атомов водорода в α -Si и α -Ge составляет примерно 1.5 эВ [10, 25], а энер-

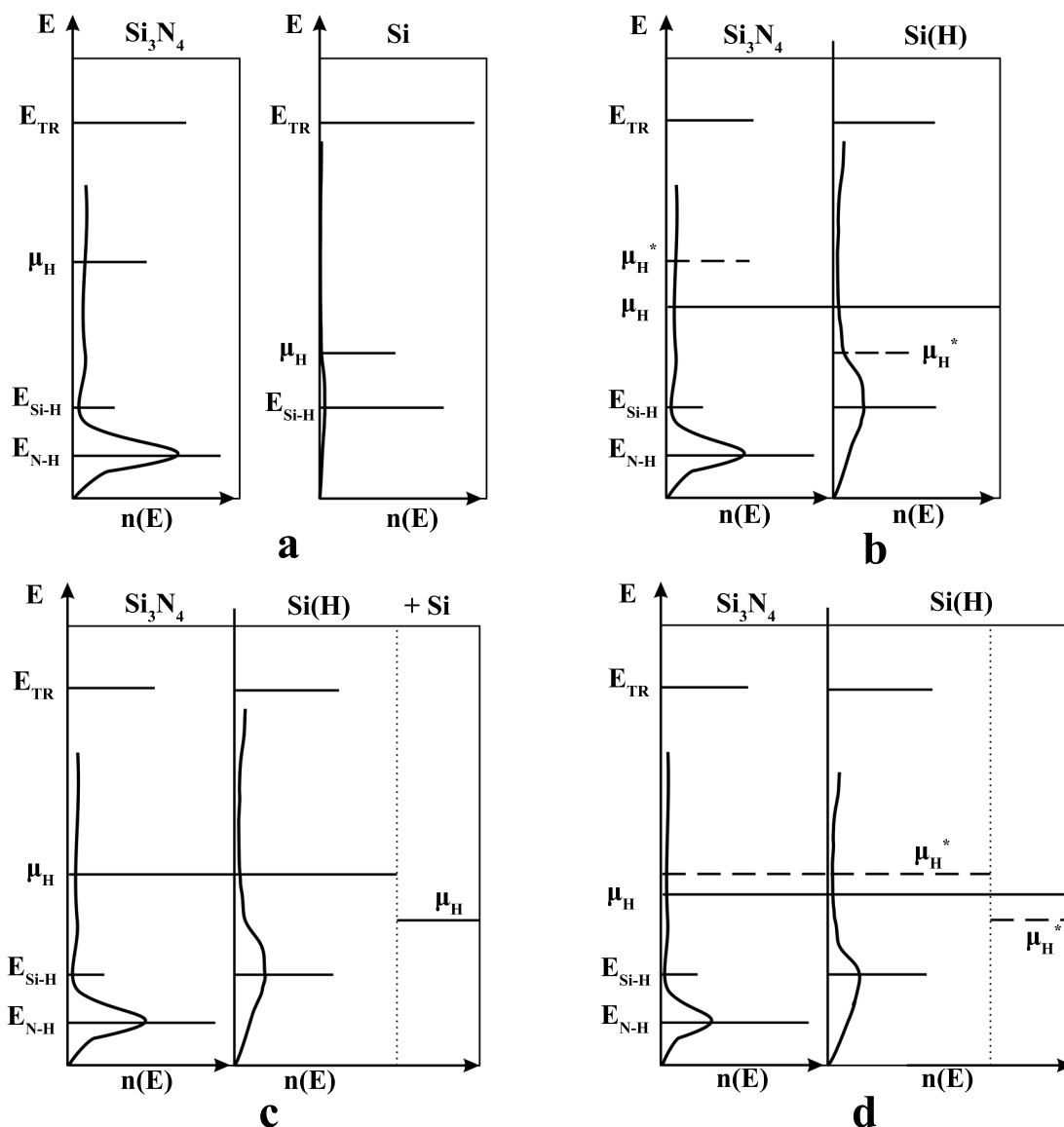


Рис. 7. Энергетическая схема процесса диффузии атомов водорода из диэлектрической подложки (Si_3N_4) в растущий слой Si: *a* — исходные состояния Si_3N_4 (левая панель) и Si (правая панель); *b* — выравнивание положения μ_{H} , формирование слоя Si(H); *c* — продолжение роста и добавление слоя +Si; *d* — выравнивание положения μ_{H} ; μ_{H}^* — исходное положение химического потенциала до выравнивания

гии связи N–H и Si–H — примерно 4 и 3 эВ [12]. В предлагаемой модели диффузия атомов водорода рассматривается как их движение по межузельным состояниям с образованием связей с двумя атомами кремния (германия) Si–H–Si (Ge–H–Ge), расположенными в узлах решетки, за счет разрыва «слабых» связей Si–Si (Ge–Ge). Это так называемый в англоязычной литературе "bond-centered defect". С возрастанием беспорядка в кристаллической решетке число «слабых» связей Si–Si (Ge–Ge) возрастает. Связи Si–H и Ge–H являются ловушками, ограничивающими скорость диффузии,

образование которых происходит при взаимодействии атома водорода с атомом Si (Ge), имеющим оборванную связь. Основное понятие в модели — химический потенциал μ_{H} атомов водорода. На рис. 7*a* (правая панель) представлена энергетическая схема процесса диффузии атомов водорода в Si. Самый глубокий уровень $E_{\text{Si-H}}$ (состояние с самой высокой энергией) — это положение ловушек Si–H. Они занимают уровни ниже μ_{H} . Диффузия атомов водорода происходит при образовании связей Si–H–Si, энергетический уровень которых расположен выше μ_{H} (мелкий энергетический уро-

вень). Это так называемый транспортный уровень E_{TR} . Если в кристаллической структуре достаточное количество «слабых» связей Si–Si, то атомы водорода могут переходить с уровня μ_H на E_{TR} , и наблюдается их диффузия. Положение μ_H зависит от концентрации атомов водорода. Чем она выше, тем выше положение (меньше энергия) μ_H . Это косвенно подтверждается результатами работы [9], в которой наблюдалось увеличение коэффициента диффузии с увеличением концентрации атомов водорода в Si. В структурах, сформированных из слоев с различным содержанием атомов водорода, должно произойти выравнивание уровней μ_H и будет наблюдаться диффузия атомов водорода.

В исследуемых структурах наибольшая концентрация атомов водорода в диэлектрическом слое Si_3N_4 , где положение μ_H выше, чем в растущем слое Si, а для начала диффузии необходимо преодоление высокого энергетического барьера (рис. 7а, левая панель), так как атомы водорода связаны как N–H. На рис. 7а показано первоначальное расположение уровней энергии в Si_3N_4 и Si. С началом роста (рис. 7б) вследствие различного положения μ_H в Si_3N_4 и Si происходит переход атомов водорода из слоя Si_3N_4 в слой Si. Устанавливается новое положение (выравнивание) μ_H . Если рост слоя Si (на рис. 7б обозначен как Si(H)) прекращается, то переход атомов водорода из Si_3N_4 также прекращается. Если рост продолжается, то у ростовой поверхности формируется область с более низким положением μ_H (на рис. 7с обозначена как +Si), и должно произойти выравнивание (снижение) его положения во всем выращенном слое Si. Вновь возникающая разность значений химических потенциалов между слоями Si_3N_4 и Si заставляет атомы водорода переходить из слоя Si_3N_4 в слой Si, и μ_H занимает новое положение (рис. 7д).

Таким образом, диффузия атомов водорода происходит только непосредственно во время роста слоя Si, что и приводит к зависимости от его толщины. Рассмотрим влияние температуры роста на этот процесс. С увеличением температуры роста и переходом к поликристаллической структуре слоев Si и Ge из-за усиления колебаний атомов решетки или увеличения беспорядка в областях межзеренных границ увеличивается количество «слабых» связей Si–Si (Ge–Ge) и ускоряется термодиффузия атомов водорода, что приводит к более быстрому выравниванию химического потенциала μ_H в растущей пленке Si (Ge). Еще одним фактором, ускоряющим диффузию водорода, может быть другой механизм диффузии в монокристаллической части по-

ликристаллической структуры. Известно, что энергия активации диффузии водорода в c-Si составляет около 0.48 эВ [26], а значение коэффициента диффузии уменьшается с увеличением содержания атомов водорода [27]. Также при высоких температурах роста может происходить термодесорбция атомов водорода из приповерхностной области [25], что понижает уровень μ_H и способствует переходу атомов водорода в растущую пленку Si [9, 28].

В ИК-спектрах структур со слоями Ge толщиной 50 нм (рис. 6б, с) наблюдается более заметное уменьшение интенсивности полос поглощения N–H в образцах с аморфными пленками. Это может быть связано со структурой растущих пленок [22]. Рост поликристаллических слоев начинается с формирования зерен небольшого размера с большой долей межзеренных границ в объеме пленки, где, вероятно, может содержаться большое число атомов с оборванными связями — глубокими ловушками для атомов водорода. По мере увеличения толщины пленки их число уменьшается, что усиливает диффузию атомов водорода. Как явствует из ИК-спектров структур с поликристаллическими слоями Si и Ge [17, 20, 21], в poly-Si и poly-Ge не наблюдалось формирования полос поглощения Si–H_x или Ge–H_x. Возможно, это связано с их недостаточной концентрацией или формированием связей Si–H (Ge–H), не являющихся ИК-активными.

Нанесение слоев Si(Ge) изменяло интенсивность полос поглощения Si–N ($\sim 860 \text{ см}^{-1}$) и Si–O ($\sim 960 \text{ см}^{-1}$). Как показали результаты исследования методом фотоэлектронной спектроскопии с послойным травлением [21], одновременно с уходом атомов водорода из диэлектрической пленки происходит встречная диффузия атомов Si(Ge) в нее. Изменение интенсивности полосы поглощения Si–N связано с уменьшением концентрации атомов водорода в Si_3N_4 , сопровождающимся разрывом связей N–H и формированием вместо них связей Si–N. В случае роста слоя Si из растущей пленки поступают дополнительные атомы Si, и число связей Si–N возрастает. При росте пленок Ge формируются связи Ge–N, т.е. отсутствует дополнительный источник атомов Si. Еще одним фактором изменения интенсивности полосы поглощения Si–N является то, что внедрение дополнительных атомов Si не вносит искажений в структуру Si_3N_4 и может улучшать порядок в ней, а атомы Ge, имеющие больший размер, могут вносить такие искажения. Ослабление поглощения в полосе Si–O ($\sim 960 \text{ см}^{-1}$) связано с разрушением этих связей в слое оксинитрида при диффузии через него атомов Ge [21].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С помощью методов ДБОЭ и ИК-спектроскопии изучены поликристаллические и аморфные пленки Si и Ge, выращенные на диэлектрических подложках $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}(001)$. В результате нанесения слоев Si и Ge наблюдалось значительное падение интенсивности полос поглощения, связанных с колебаниями связей N–H, которое усиливалось с увеличением толщины растущих пленок. Для объяснения экспериментальных результатов предложено использовать модель, основанную на предположении, что в отсутствие термодиффузии переход атомов водорода из диэлектрического слоя Si_3N_4 в растущую пленку Si или Ge контролируется разным положением уровней химического потенциала атомов водорода в них. Разность химических потенциалов атомов водорода в Si_3N_4 и пленке Si (Ge) сохраняется только во время роста пленок. Этим объясняется зависимость интенсивности полос поглощения от толщины выращенной пленки. С повышением температуры роста пленки ускоряется процесс выравнивания уровней химического потенциала между Si_3N_4 и Si (Ge) за счет возможной термодиффузии атомов водорода.

ЛИТЕРАТУРА

1. B. J. Hallam, P. G. Hamer, A. M. C. Wenham, C. E. Chan, B. V. Stefani, and S. Wenham, *Prog. Photovolt. Res. Appl.* **1**, 1217 (2020).
2. W. Soppe, H. Rieffe, and A. Weeber, *Prog. Photovolt. Res. Appl.* **13**, 551 (2005).
3. R. S. Bonilla, B. Hoex, P. Hamer, and P. R. Wilshaw, *Phys. Stat. Sol. (a)* **214**, 1700293 (2017).
4. M. Z. Rahman, *Renew. Sustain. Energy Rev.* **30**, 734 (2014).
5. A. G. Aberle, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **65**, 239 (2001).
6. J. Z. Xie, S. P. Murarka, X. S. Guo, and W. A. Lanford, *J. Vac. Sci. Technol. B* **7**, 150 (1989).
7. P. S. Peercy, H. J. Stein, B. L. Doyle, and S. T. Picraux, *J. Electron. Mater.* **8**, 11 (1979).
8. C. Boehme and G. Lucovsky, *J. Appl. Phys.* **88**, 6055 (2000).
9. W. Beyer, *Phys. Stat. Sol. (a)* **213**, 1661 (2016).
10. W. Beyer, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **78**, 235 (2003).
11. C. G. V. D. Walle and R. A. Street, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **377**, 389 (1995).
12. J. Robertson, *Phil. Mag. B* **69**, 307 (1994).
13. R. A. Street, *Phys. Rev. B* **43**, 2454 (1991).
14. P. V. Santos, N. M. Johnson, R. A. Street, M. Hack, R. Thompson, and C. C. Tsai, *Phys. Rev. B* **47**, 10244 (1993).
15. W. B. Jackson and C. C. Tsai, *Phys. Rev. B* **45**, 6564 (1992).
16. S. C. Deane and M. J. Powell, *J. Non-Cryst. Sol.* **198-200**, 295 (1996).
17. К. В. Чиж, Л. В. Арапкина, В. П. Дубков, Д. Б. Ставровский, В. А. Юрьев, М. С. Сторожевых, *Автометрия* **58**, 79 (2022).
18. P. Padushek and P. Eichinger, *Appl. Phys. Lett.* **36**, 62 (1980).
19. H. J. Stein, *J. Electron. Mater.* **5**, 161 (1976).
20. K. V. Chizh, L. V. Arapkina, D. B. Stavrovsky, P. I. Gaiduk, and V. A. Yuryev, *Mater. Sci. Semicond. Process.* **99**, 78 (2019).
21. L. V. Arapkina, K. V. Chizh, D. B. Stavrovskii, V. P. Dubkov, E. P. Lazareva, and V. A. Yuryev, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **230**, 111231 (2021).
22. M. S. Storozhevykh, V. P. Dubkov, L. V. Arapkina, K. V. Chizh, S. A. Mironov, V. A. Chapnin, and V. A. Yuryev, *Proc. SPIE* **10248**, 102480O (2017).
23. D. Davazoglou and V. E. Vamvakas, *J. Electrochem. Soc.* **150**, F90 (2003).
24. E. A. Taft, *J. Electrochem. Soc.* **118**, 1341 (1971).
25. W. Beyer, J. Herion, H. Wagner, and U. Zastrow, *Phil. Mag. B* **63**, 269 (1991).
26. A. Van Wieringen and N. Warmoltz, *Physica* **22**, 849 (1956).
27. Y. L. Huang, Y. Ma, R. Job, and A. G. Ulyashin, *J. Appl. Phys.* **96**, 7080 (2004).
28. W. Beyer, *J. Non-Cryst. Sol.* **198-200**, 40 (1996).

ЛОКАЛЬНАЯ СТРУКТУРА И ЗАТВЕРДЕВАНИЕ СТЕКЛООБРАЗУЮЩЕГО РАСПЛАВА $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_4\text{Gd}_2\text{Tb}_2$ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ: ЭКСПЕРИМЕНТ, МОДЕЛИРОВАНИЕ, МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ

С. Г. Меньшикова ^{a*}, Н. М. Щелкачев ^{b**}

^a Удмуртский федеральный исследовательский центр
Уральского отделения Российской академии наук
426067, Ижевск, Россия

^b Институт физики высоких давлений имени Л. Ф. Верещагина
Российской академии наук
142190, Москва, Троицк, Россия

Поступила в редакцию 27 октября 2023 г.,
после переработки 9 января 2024 г.
Принята к публикации 9 января 2024 г.

Высокое давление влияет на затвердевание расплава $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_4\text{Gd}_2\text{Tb}_2$ и его стеклообразующую способность. С помощью молекулярно-динамических расчетов *ab initio* показано, как локальная структура расплава изменяется с увеличением давления. Высокое давление способствует формированию икосаэдрических кластеров в расплаве. Формированию икосаэдров способствуют редкоземельные элементы: гадолиний, тербий. При давлении 10 ГПа и температуре расплава 1800 К атомы икосаэдров образуют «перколяционный кластер». При уменьшении давления концентрация икосаэдров уменьшается, при атмосферном давлении икосаэдры практически отсутствуют. Таким образом, стеклообразующая способность расплава увеличивается при повышении давления. С использованием техники глубокого машинного обучения выполнена оценка зависимости температуры стеклования T_g от высокого давления: увеличение давления от 0 до 10 ГПа повышает T_g в 1.3 раза. Исследована структура твердых образцов сплава, полученных путем охлаждения его расплава с температурой 1800 К со скоростью 1000 град/с под давлением 10 ГПа. Методами рентгеноструктурного анализа и электронной микроскопии показано, образцы плотные и однородные, структура мелкодисперсная. В сплаве синтезированы новые кристаллические фазы с кубической (*cP4/2*) и тетрагональной (*tI26/1*) структурами, стабильные длительное время в нормальных условиях. В формировании фазы с кубической структурой (*cP4/2*) основную роль выполняют редкоземельные элементы. Исследования показали, средняя твердость образцов, полученных при 10 ГПа, почти в 2 раза выше, чем исходного образца, полученного при атмосферном давлении, и составляет порядка 2 ГПа.

DOI: 10.31857/S0044451024050055

1. ВВЕДЕНИЕ

Прогресс в понимании процессов, протекающих в высокотемпературных стеклообразующих расплавах типа Al-ПМ-РЗМ (ПМ — переходный металл, РЗМ — редкоземельный металл) с содержанием алюминия 80–90 ат.% в широком температурном

диапазоне [1, 2], а также в изучении влияния высоких давлений и скоростей охлаждения на их затвердевание [3] имеет высокую научную значимость. При скоростях охлаждения 100000 град/с сплавы стеклуются с образованием лент толщиной порядка 50–60 мкм. Представляет интерес повышение стеклообразующей способности расплавов системы этого типа. Есть основание полагать, что экстремальные воздействия (ЭВ) (высокие давления, температуры и скорости охлаждения) способны помочь в решении данного вопроса. Отработка методик получения сплавов в подобных экстремальных усло-

* E-mail: svetlmenish@udman.ru

** E-mail: n.chtelkatchev@gmail.com

виях является сложной технологической задачей. В условиях высоких давлений и температур при высокоскоростном затвердевании расплава отмечаются физические и химические процессы, протекание которых в обычных условиях затруднительно, в ряде случаев невозможно из-за термодинамических ограничений. ЭВ влияют как на кинетику, так и на термодинамику затвердевания расплава. В частности, высокое давление увеличивает вязкость металлического расплава, а также модифицирует структуру ближнего порядка в сторону более плотных упаковок, в том числе некристаллических. Помимо общей тенденции к измельчению зерен, ЭВ способствуют кристаллизации новых метастабильных фаз, обычно более плотных. В результате могут быть получены материалы с уникальными структурами и свойствами [3–8].

Быстрое развитие компьютерных технологий делает возможным проведение теоретических исследований реалистичных систем с использованием различных методов, в частности, в рамках подхода *ab initio* (AIMD) [9]¹⁾. В последнее время в изучении физики конденсированных сред все большее распространение получают методы расчетов *ab initio*, основанные на теории функционала плотности (DFT)²⁾, что представляет высокий интерес и для изучения сплавов вышеуказанной системы [10].

Большой интерес представляет также использование искусственных нейронных сетей (ИНС) (глубокое машинное обучение) [11, 12] в квантовой механике, в коррелированных системах, в системах с фазовыми переходами. «Глубокое» обозначает степень сложности (глубины) нейросети, которая зачастую может быть весьма поверхностной. Обучение нейронной сети — это процесс, в котором параметры нейронной сети настраиваются посредством моделирования среды, в которую эта сеть встроена. Тип обучения определяется способом подстройки параметров. Основной недостаток ИНС заключается в необходимости получения большого экспериментального материала для обучения сети, а также низкая прогностическая способность. Достоинства: возможность получать высокую точность расчета, а также, когда нет физических моделей структурной или иной зависимости — простота обучения и использования при наличии необходимого экспериментального материала и программного обеспе-

чения [13]. С помощью ИНС представляется возможным построение моделей расчета предела текучести и деформационного упрочнения промышленных алюминиевых сплавов по параметрам структуры [13], предсказание поведения ближнего упорядочения в бинарных и многокомпонентных сплавах на основе алюминия, в зависимости от концентрации и температуры [14]. Недавно было обнаружено, что зарождение кристаллов в переохлажденном расплаве достигает максимальной скорости при температуре стеклования и сильно замедляется при глубоком охлаждении в стеклообразном состоянии [15].

Ранее мы провели экспериментальные и теоретические исследования затвердевания четырехкомпонентного стеклообразующего расплава $\text{Al}_{86}\text{Ni}_2\text{Co}_6\text{Gd}_6$ под высоким давлением [16]. Обнаружили новые метастабильные фазы, формирующиеся в сплаве после термобарического воздействия на расплав при затвердевании. Показали, что стеклообразующая способность расплава увеличивается с ростом высокого давления. Подобные исследования в литературе практически отсутствуют. Цель настоящей работы — исследование локальной структуры расплава при малом и высоком давлениях в более сложном стеклообразующем сплаве $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_4\text{Gd}_2\text{Tb}_2$; исследование влияния высокого давления на затвердевание расплава и его стеклообразующую способность.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

2.1. Эксперимент

Слиток заданного состава получали методом сплавления чистых металлов в корундовых тиглях в печи Таммана. В качестве исходных компонентов использовали элементы с содержанием основного металла: алюминий 99.999, никель 99.9, кобальт 99.9, гадолиний 99.9, тербий 99.9 (масс.%). Химический анализ слитка показал, содержание основных элементов соответствовало заданному составу в пределах $\pm 0.2\%$ от номинального. Полученный образец рассматривали в качестве исходного. Образцы для исследований под высоким давлением 10 ГПа получали в камере типа «тороид» [17]. Нагрев и плавление образца проводили пропусканием через него переменного тока. В качестве среды, передающей давление, использовали алгетский камень. Схема эксперимента: установление давления → импульсный нагрев → выдержка при установленных давлении и температуре → охлаждение без сборо-

¹⁾ Метод расчета из первых основополагающих принципов, описывающий атомные взаимодействия с учетом квантовых эффектов.

²⁾ Метод расчета электронной структуры систем многих частиц в квантовой физике и квантовой химии.

са давления до комнатной температуры → уменьшение высокого давления до атмосферного. Скорость охлаждения расплавов 1000 град/с, температура расплава перед закалкой 1800 К. Методом рентгеноструктурного анализа определяли фазовый состав образцов. Для исследования элементного состава, морфологии и размера структурных составляющих сплава использовали методы электронной микроскопии. Измерения твердости H_V выполняли на твердомере ПМТ-3М. Нагрузка, применяемая к индентору ~ 50 г, время нагружения ~ 10 с. Значения H_V усредняли по 20 измерениям.

2.2. Моделирование

Структурные исследования расплава выполняли методом функционала плотности на основе VASP (The Vienna Ab initio Simulation Package). Рассматривали элементарные ячейки из 512 атомов с периодическими граничными условиями, в Гамма-точке. Энергия отсечки базиса плоских волн 500 эВ. Ввиду малых концентраций Ni, Co, Gd и Tb моделирование производили с использованием 10 независимых реплик расплавов с разным начальным случайным расположением атомов. Случайные начальные конфигурации создавали на основе потенциала взаимодействия твердых сфер между атомами и классического (LAMMPS) молекулярно-динамического моделирования. Наиболее неупорядоченные конфигурации отбирали алгоритмом УСПЕХ. Равновесная конфигурация достигалась VASP моделированием системы в NPT ансамбле в течение не менее 10 пс с шагом 1 фс. Далее системы моделировали VASP в NVT ансамбле в термостате Nose-Hoover при высоких температурах и давлениях. Для исследования расплава при глубоком переохлаждении построили потенциал взаимодействия машинного обучения (MLIP) с использованием квантовых данных молекулярной динамики в качестве обучающего набора данных. Использовали пакет DEEPM³⁾ в качестве ядра для сборки MLIP. Выбрали дескрипторы «se_a» с отсечкой 7 Å для обработки данных обучения. Начальную тренировочную базу данных для машинного обучения MLIP получали случайной выборкой 20% данных квантовой молекулярной динамики, остальные 80% данных использовали в проверочном датасете. Многоэтапное дообу-

³⁾ DEEPM предназначен для минимизации усилий, необходимых для построения основанной на глубоком машинном обучении модели межатомной потенциальной энергии и силового поля, а также для выполнения классических вычислений молекулярной динамики (CMD).

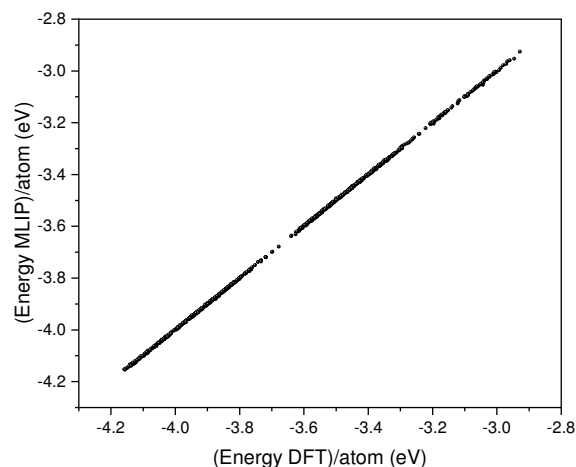


Рис. 1. Сравнение энергии, рассчитанной MLIP и DFT

чение потенциала MLIP проводили с помощью пакета DPGEN (Deep Potential GENerator), который на каждом этапе оценивает точность классической молекулярной динамики путем вычисления дисперсии межатомных сил по ансамблю четырех реплик MLIP и отправляет на расчет DFT VASP наименее точные конфигурации с последующим добавлением их в тренировочную базу данных. Процесс сходится, когда дисперсия межатомных сил становится меньше заданного порога для 90% конфигураций, которые генерирует DPGEN. Так как часть атомов в сплаве имеют очень маленькую концентрацию, возникла необходимость добавить в тренировочную базу данных небольшое количество высокоэнтропийных конфигураций, где концентрации всех элементов одного порядка. Это необходимо для стабилизации сходимости процедуры обучения MLIP в случае легированных сплавов, где легирующие элементы, в силу малой концентрации, редко сближаются. В результате точность MLIP, по сравнению с первоначальным расчетом, составила

Energy MAE/Natoms	$1.808373 \cdot 10^{-3}$ эВ,
Energy RMSE/Natoms	$1.103514 \cdot 10^{-1}$ эВ,
Force MAE	$2.263140 \cdot 10^{-03}$ эВ/Å,
Force RMSE	$1.570985e - 01$ эВ/Å,
Virial MAE/Natoms	$9.203836 \cdot 10^{-03}$ эВ,
Virial RMSE/Natoms	$1.190558 \cdot 10^{-23}$ эВ.

Здесь MAE обозначает среднюю абсолютную ошибку (Mean Absolute Error), а RMSE – среднеквадратичную ошибку (Root Mean Square Error) по сравнению с DFT. Отклонение MLIP расчетов от DFT графически показано на рис. 1 и рис. 2. Классическая молекулярная динамика (CMD) с MLIP имеет точность, сравнимую с квантовой молекулярной динамикой. Наиболее

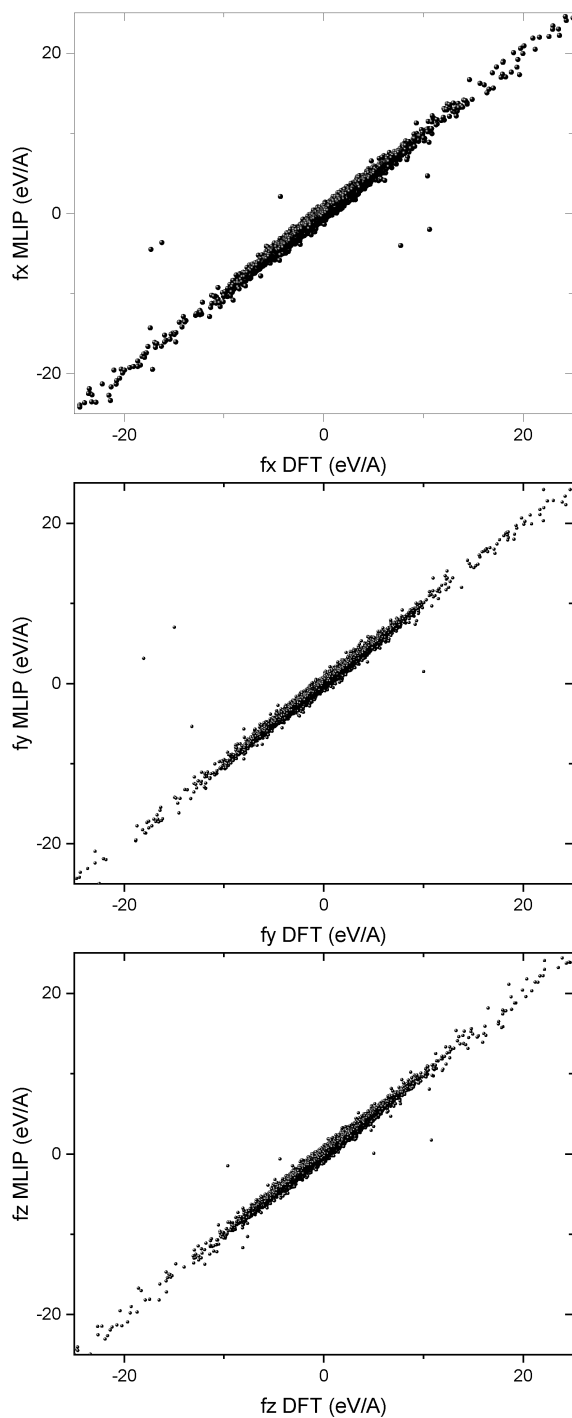


Рис. 2. Сравнение сил, вычисленных с помощью MLIP и DFT

важным является то, что CMD может иметь дело с достаточно большим количеством частиц и распространять их в течение 10 мкс периодов времени, а не 1–10 нс. Мы выбрали LAMMPS для CMD. Для CMD-моделирования расплава выбирали ячейку с 13824 атомами в периодических граничных

условиях и шагом по времени 2 фс. Сплав моделировали при охлаждении с помощью термостата Nose-Hoover NPT от температуры 2000 до 100 К для 10 миллионов шагов MD.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

3.1. Эксперимент

Ранее исследовали образцы сплава $\text{Al}_{86}\text{Ni}_2\text{Co}_6\text{Gd}_6$, полученные в зависимости от высокого давления (до 10 ГПа) и температуры закалки расплава (до 1800 К) [18]. Было показано, при давлениях 7–10 ГПа в сплаве формируются новые метастабильные фазы: фаза $(\text{Al}_3\text{Gd})^*$ (по типу Al_3U), со структурой примитивного куба ($cP4/2$) и фаза $(\text{Al}_8(\text{Co/Ni})_4(\text{Gd}))^*$ (по типу $\text{Al}_8\text{Cr}_4\text{Gd}$) с тетрагональной структурой ($tI26/1$). Исследования, выполненные в настоящей работе, показали, что и в сплаве $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_4\text{Gd}_2\text{Tb}_2$, при тех же условиях получения, формируются такие же по составу фазы (см. таблицу), однако морфология структуры другая. Редкоземельные металлы, в нашем случае, Gd и Tb, проявляют между собой большое сходство химических и физических свойств, что объясняется почти одинаковым строением наружных электронных уровней их атомов, имеют примерно равные радиусы атомов и легко взаимозаменяются в исследуемом сплаве. Таким образом, формирование тех же фаз в сплаве $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_4\text{Gd}_2\text{Tb}_2$, что и в сплаве $\text{Al}_{86}\text{Ni}_2\text{Co}_6\text{Gd}_6$ вполне оправдано. На рис.3а представлена микроструктура образца сплава $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_4\text{Gd}_2\text{Tb}_2$, полученного в печи Таммана методом сплавления чистых компонентов при атмосферном давлении и образца, полученного под давлением 10 ГПа (рис.3б). Температура закалки в обоих случаях 1800 К. На рис.3 видно, что структура образца, полученного под давлением 10 ГПа более дисперсная, по сравнению с образцом, полученным при нормальном атмосферном давлении. Исследования показали также, что образец, полученный под высоким давлением, однородный, плотный, без усадочных раковин и пор; средняя микротвердость почти в два раза выше, чем в исходном образце, и составляет порядка 2 ГПа. Обнаруженные новые фазы формируются в сплавах при высоких давлениях 7–10 ГПа. При давлениях менее 7 ГПа в сплаве присутствуют только равновесные фазы.

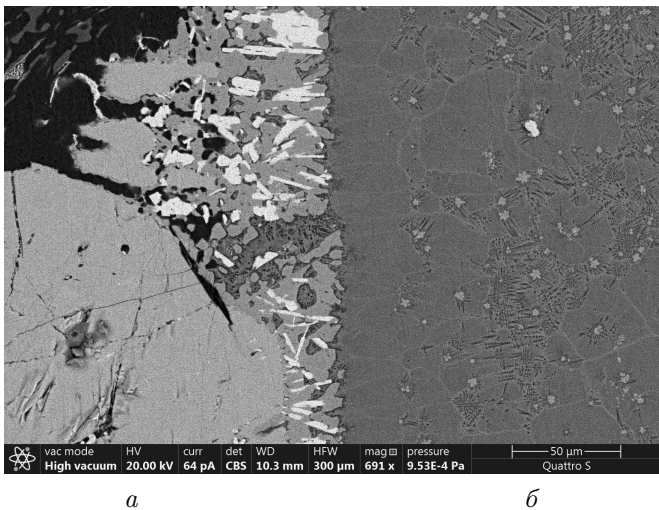


Рис. 3. Микроструктура образцов сплава $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_4\text{Gd}_2\text{Tb}_2$, полученного в печи Таммана методом сплавления чистых компонентов при атмосферном давлении (а) и полученного под давлением 10 ГПа (б) (1800 К, 1000 град/с)

Таблица. Условия получения и фазовый состав образцов сплава $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_4\text{Gd}_2\text{Tb}_2$

№	Условия получения	Фазовый состав
1	атм. давление (1800 К)	$\alpha\text{-Al}$; Al_3Gd (рекс., $hP8/3$); $\text{Al}_{19}\text{Ni}_5(\text{Tb/Gd})_3$ (орт., $oC108/4$)
2	10 ГПа (1800 К)	$\alpha\text{-Al}$, $\text{Al}_3(\text{Gd/Tb})^*(\text{Ni/Co})$ (по типу Al_3Er) (куб., $cP4/2$), $\text{Al}_8(\text{Co/Ni})_4(\text{Gd/Tb})^{**}$ (по типу $\text{Al}_8\text{Cr}_4\text{Gd}$) (тетр., $tI26/1$)

3.2. Моделирование

В результате моделирования расплавов при 1800 К и давлениях 0 и 10 ГПа получены и исследованы радиальные функции распределения атомов (ФРРА). На рис. 4 представлены полные ФРРА. При повышении давления до 10 ГПа отмечено увеличение пиков и их смещение, что свидетельствует об увеличении степени локального упорядочения в расплаве при высоком давлении. Анализ парциальных ФРРА расплава при 0 и 10 ГПа (1800 К) для алюминия, кобальта, никеля, гадолиния и тербия показал, высокое давление влияет, в основном, на локальное окружение алюминия, гадолиния и тербия в расплаве. Аналогичная ситуация отмечена нами ранее для сплава $\text{Al}_{86}\text{Ni}_2\text{Co}_6\text{Gd}_6$ [16], где высокое давление оказывает влияние, в первую очередь, на локальное окружение алюминия и гадолиния в расплаве.

Для анализа ближнего порядка в расположении атомов использовали метод, известный как «polyhedral template matching» [19]. Исходя из ФРРА, максимальная длина связи выбрана равной 3 Å. В качестве параметра, управляющего определени-

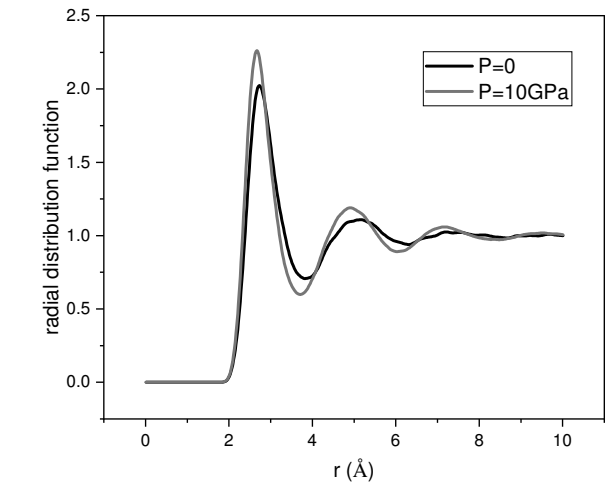


Рис. 4. Полная ФРРА расплава $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_4\text{Gd}_2\text{Tb}_2$ (1800 К)

ем локальной симметрии, выбран RMSD (Root Mean Square Deviation)⁴⁾, равный 1.1. Анализ молекулярной динамики траекторий показал, при нулевом давлении в расплаве $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_4\text{Gd}_2\text{Tb}_2$ в неболь-

⁴⁾ Мера среднего расстояния между атомами.

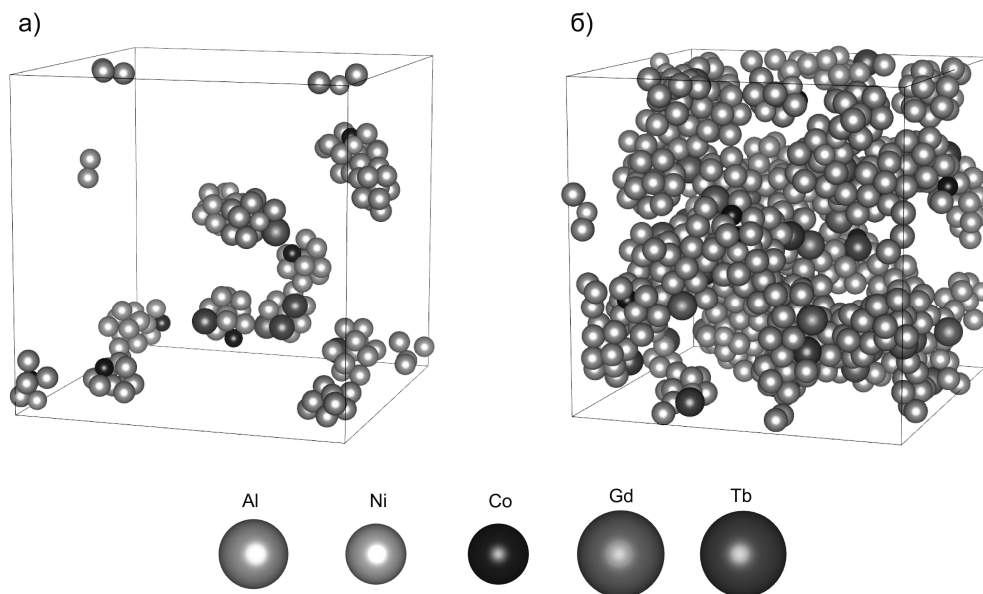


Рис. 5. Икосаэдрические кластеры в расплаве $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_4\text{Gd}_2\text{Tb}_2$ при 0 (а) и 10 (б) ГПа (1800 К)

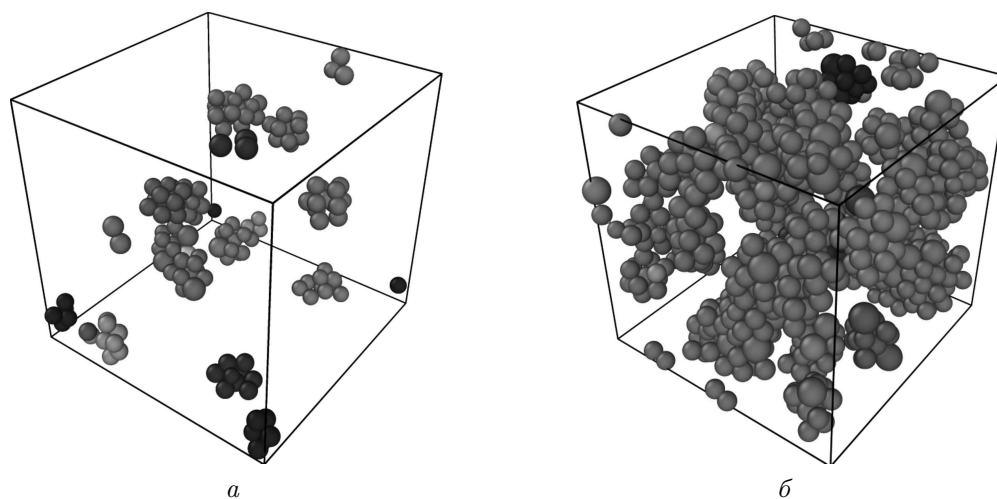


Рис. 6. Разбиение икосаэдрической материи на кластеры в расплаве $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_4\text{Gd}_2\text{Tb}_2$ при 0 (а) и 10 (б) ГПа (1800 К)

шой концентрации (0.5%) присутствуют икосаэдрические кластеры (рис.5 а). При повышении давления до 10 ГПа их концентрация увеличивается не менее чем до 4% (рис.5 б). В этом расчете концентрации икосаэдров учитывались только атомы, имеющие ближайшее окружение икосаэдра, т.е. в центре икосаэдра. Разбиение икосаэдрической материи на кластеры в расплаве показано также на рис.6 а, б. Одним цветом объединены атомы, принадлежащие одному кластеру. Зеленым цветом показана «сеть» икосаэдров — «перколяционный кластер»⁵⁾. То есть

при 10 ГПа атомы образуют «перколяционный кластер», а при атмосферном давлении-нет. Для обоих давлений расчеты выполнены при 1800 К. Если при нулевом давлении охладить системы на 200 К, от 1800 до 1600 К, после снижения давления от 10 до 0 ГПа концентрация икосаэдров уменьшается. Сеть икосаэдров в металлической жидкости обычно является признаком ее стеклообразующей способности. Таким образом, можно полагать, что с увеличением давления увеличивается и стеклообразующая способность расплава.

⁵⁾ Кластер, в котором есть путь от верхней до нижней границы рассматриваемой области.

Рисунок 7 а демонстрирует процент количества атомов в центре икосаэдров к общему количеству

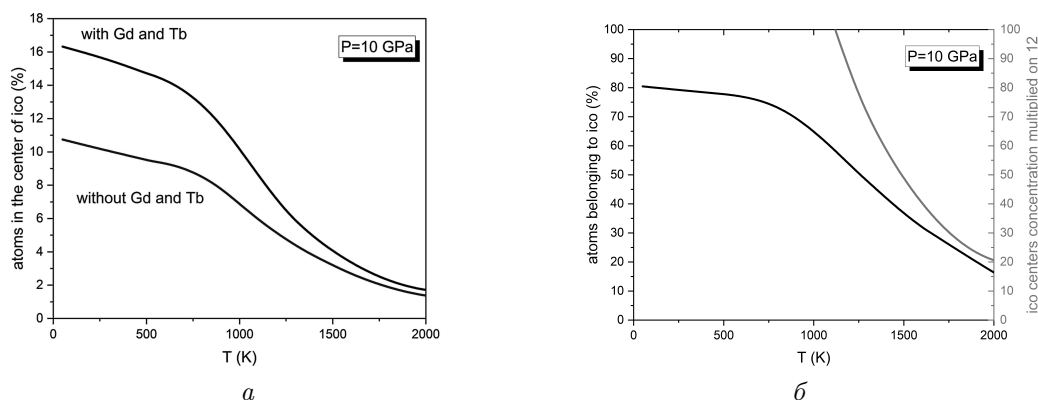


Рис. 7. Количество атомов в центре икосаэдров (а) и принадлежащих икосаэдрам (б), к общему числу атомов (%)

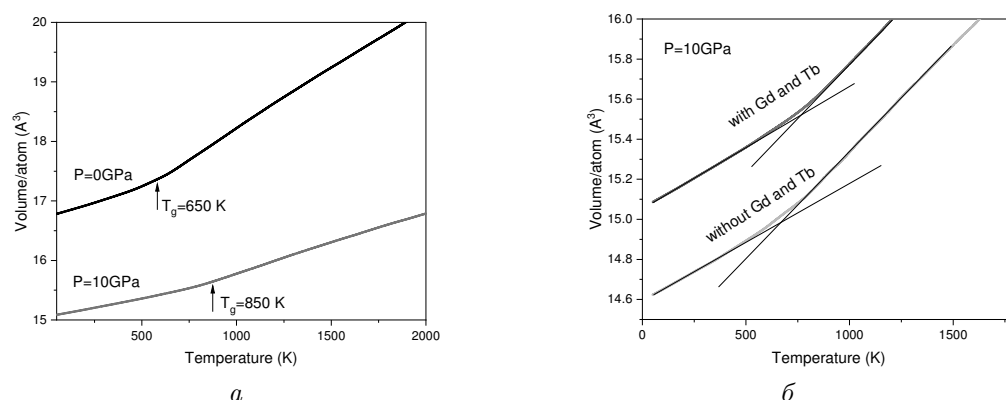


Рис. 8. Температурная зависимость объема сплава $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_4\text{Gd}_2\text{Tb}_2$, приходящегося на один атом, при давлениях 0 и 10 ГПа (а), та же зависимость при 10 ГПа в отсутствие Gd и Tb (б)

атомов при давлении 10 ГПа в температурном диапазоне от 2000 до 0 К. Рассмотрены два случая: с присутствием в расплаве РЗМ (черная кривая) и без РЗМ (синяя кривая). На рис.7 а видно, что при высоких температурах этот процент практически одинаков для обеих кривых, при уменьшении температуры отмечается существенное различие. На рис.7 б представлено процентное изменение с температурой количества атомов, принадлежащих икосаэдрам. Дальнейшие теоретические исследования показали, сплав без РЗМ аморфизуется, но пленочно, а с присутствием РЗМ-объемно. В ряде работ, в частности в [20, 21], показано, что и некоторые однокомпонентные экстремально охлажденные металлические расплавы характеризуются наличием икосаэдрического ближнего порядка. Обычно икосаэдрические кластеры в таких расплавах, например, в расплаве алюминия, при высоких температурах отсутствуют или их количество незначительно отличается от нуля [15].

Известно, что, как и при фазовых переходах второго рода, при стеклообразовании происходит резкое изменение теплоемкости и коэффициента термического расширения [22–24]. В этом случае наблюдается излом на температурной зависимости объема. Мы выполнили оценку зависимости температуры стеклования от давления на основе температурной зависимости объема, приходящегося на один атом. С помощью атомистического компьютерного моделирования охлаждения расплава из 5000 атомов, при использовании MLP определена температура стеклования (T_g): порядка 650 К при нормальном давлении и 850 К при давлении 10 ГПа для сплава $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_4\text{Gd}_2\text{Tb}_2$ (рис.8 а). Для сплава $\text{Al}_{86}\text{Ni}_2\text{Co}_6\text{Gd}_6$: порядка 600 К при нормальном давлении и порядка 820 К при давлении 10 ГПа [16]. Полученные значения температур стеклования составляют 0.5 от их температуры плавления, что хорошо согласуется с литературными данными для аналогичных металлических систем [25]. Мы оценили, на сколько меняется T_g сплава $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_4\text{Gd}_2\text{Tb}_2$, если

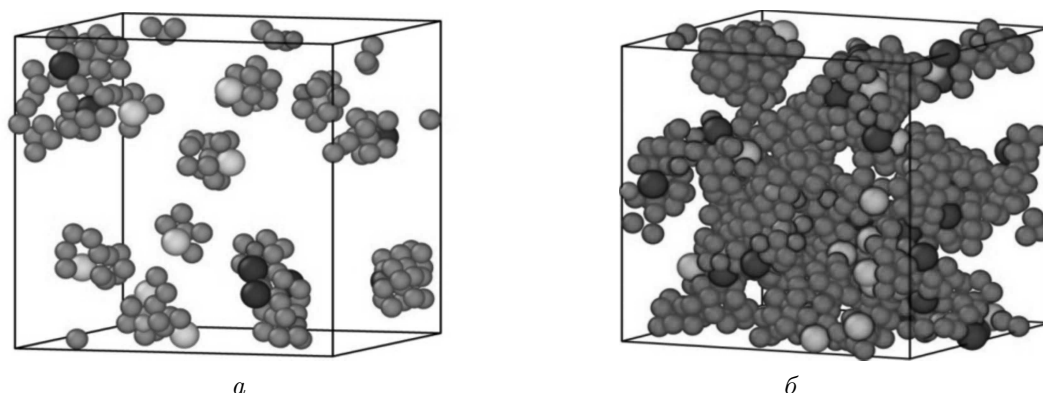


Рис. 9. Икосаэдры в объеме переохлажденного расплава с температурой 500 К, ниже T_g . Атомы алюминия выделены красным, атомы никеля — синим, атомы кобальта — желтым (а) и коричневым (б), атомы гадолиния — светло-зеленым, атомы тербия — темно-зеленым

из сплава убрать РЗМ. Удаление Tb и Gd приводит к уменьшению T_g примерно на 65 К (рис.8 б).

Таким образом, внешние условия и состояние расплава влияют на его затвердевание. Это необходимо учитывать при разработке технологических процессов получения материалов с заданными свойствами. Известно, что кристаллизация расплава происходит за счет образования кристаллических зародышей, перерастающих в кристаллы. Самопроизвольно возникающие центры кристаллизации (зародыши) приводят к уменьшению объемной свободной энергии и увеличению межфазной энергии за счет границы раздела. Для образования зародышей кристаллов в жидкости необходимы определенные условия, в частности, необходимо появление микрообъемов, где взаимное расположение атомов соответствовало бы кристаллической решетке формирующегося твердого сплава. В исследуемом расплаве при атмосферном давлении и температуре 1800 К обнаружено небольшое количество икосаэдрических кластеров, концентрация которых увеличивается с ростом давления. В икосаэдрических кластерах важно знать, как расположены атомы в пространстве. Икосаэдрические кластеры под воздействием внешних условий (температуры, давления и т. д.) могут перестраиваться и изменяться с целью увеличения плотности и занимаемого объема, поскольку это выгодно энергетически [26]. Здесь важное влияние оказывает и относительный размер атомов, который в случае металлов (наш случай) играет роль длины связи. Чем больше разница в размерах атомов, содержащихся в сплаве, тем больше соседей можно разместить вокруг атома. Соответственно, чем больше один из атомов, по сравнению со вторым, тем больше у него будет соседей, и, со-

ответственно, тем меньше соседей будет у атома с меньшим радиусом. Радиусы атомов: алюминия 143, никеля 124, кобальта 125, гадолиния 179 и тербия 180 пм. Радиусы атомов Gd и Tb имеют наибольшее значение, и вокруг каждого из них должно быть более 12 атомов. В действительности, как показывает наше исследование, гадолиний и тербий не занимают позиции в центре икосаэдров, а являются лишь своего рода катализаторами образования икосаэдров. На рис. 9 показаны икосаэдры в переохлажденном расплаве с температурой 500 К, ниже T_g , для давлений 0 и 10 ГПа. Выбраны не все икосаэдры, а только почти совершенные, т. е. практически «идеальные», с минимальными деформациями. Как видно из рис. 9, икосаэдрические кластеры, в основном, включают атомы алюминия и гадолиния или алюминия и тербия, а также небольшое количество атомов никеля и кобальта. Как показывают наши расчеты, высокое давление оказывает влияние, в первую очередь, на локальное окружение Gd, Tb и Al в расплаве. Это термодинамически выгодно для образования первичных кристаллов новой метастабильной фазы $Al_3(Gd/Tb)$, обнаруженной нами в твердом образце. Далее в условиях сжатия формируются аномально пересыщенный твердый раствор $Al(Gd/Tb)$ и новая фаза $Al_8(Co/Ni)_4(Gd/Tb)$. Эти метастабильные фазы, полученные под высоким давлением, достаточно стабильны длительное время в нормальных условиях.

Выполненный в настоящей работе, а также других работах [16, 18] реальный эксперимент показал, что многокомпонентные расплавы Al-ПМ-РЗМ затвердевают в ряд нетривиальных фаз, имеющих разные кристаллические решетки. Если система затвердевает при высоком давлении, то синтезируют-

ся также метастабильные фазы. Численное атомистическое моделирование на сегодняшний день с большим трудом может достоверно описать затвердевание сложной системы из 4 или 5 элементов в несколько сосуществующих нетривиальных твердых фаз. Но можно достаточно эффективно моделировать расплав с первопринципной точностью. Выполненное нами численное моделирование расплавов Al-ПМ-РЗМ позволило понять, в чем заключается роль примесей, из-за которых при затвердевании формируются метастабильные фазы. Показано, легирующие примеси РЗМ являются катализаторами формирования икосаэдров в расплаве. Один атом примеси локально упорядочивает 12 атомов. Концентрация икосаэдров в расплаве выше при высоком давлении. Таким образом, примеси РЗМ повышают стеклообразующую способность системы. Довольно давно известно, сплавы исследуемой системы стеклуются при быстром охлаждении расплава (со скоростью 1000000 град/с) в форме тонких лент, толщиной порядка 50 мкм. Мы впервые это микроскопически объяснили, исследуя расплав, в том числе в условиях переохлаждения. При медленном охлаждении система не стеклует, а формирует несколько сосуществующих твердых фаз с разными кристаллическими решетками. Вероятно, в этом эффекте тоже косвенно сказывается высокая стеклообразующая способность сплавов, так как образуется сравнительно много совершенно непохожих друг на друга фаз. Возникновение такой многофазной неупорядоченной поликристаллической системы-результат высокой стеклообразующей способности и фрустрации, из-за наличия большого количества икосаэдров в расплаве. Известно, что стеклообразующая способность фаз-стеклообразователей (аморфизаторов) обусловлена их химической природой, наличием икосаэдрической координации. Как правило, они имеют сложную кристаллическую решетку. Возникающая в исследованном сплаве новая первичная фаза $\text{Al}_3(\text{Gd/Tb})$ может рассматриваться как аморфизатор сплава. Известно, что дополнительным воздействием высокими давлениями на расплав при быстрой закалке можно получить максимально «уплотненные»–«идеальные» стекла. Нами показано наличие «перколяционного кластера» при высоком давлении в исследуемом металлическом расплаве, что обычно является признаком стеклообразующей способности расплавов. Однако в рассматриваемом сплаве при выбранных условиях получения, мы не обнаружили аморфной составляющей. По-видимому, для аморфизации исследуемого рас-

плава необходимы гораздо более высокие давления при той же (рассматриваемой) экспериментальной скорости охлаждения.

4. ВЫВОДЫ

1. Эксперимент показал, при затвердевании расплава $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_4\text{Gd}_2\text{Tb}_2$ с температурой 1800 К под давлением 7–10 ГПа при скорости охлаждения 1000 град/с в сплаве формируются новые кристаллические метастабильные фазы: высокосимметричная фаза $\text{Al}_3(\text{Gd/Tb})$ с примитивной кубической решеткой ($cP4/2$), упорядочена по типу Al_3U , содержит Co и Ni и фаза $\text{Al}_8\text{Co}_4(\text{Gd/Tb})$ (типа $\text{Al}_8\text{Cr}_4\text{Gd}$) с тетрагональной структурой ($tI26/1$). Твердый раствор $\alpha\text{-Al}$ аномально пересыщен гадолинием и тербием. Структура образца мелкокристаллическая с высокой плотностью. Средняя микротвердость высокая за счет твердорастворного и дисперсионного упрочнения. При давлениях менее 7 ГПа в сплаве формируются только равновесные фазы.

2. С помощью численного моделирования определена роль примесей в сплаве, из-за которых формируются метастабильные фазы. Легирующие примеси РЗМ являются катализаторами формирования икосаэдрических кластеров в расплаве. При увеличении давления от 0 до 10 ГПа их количество увеличивается в 8 раз, формируя «сеть»–«перколяционный кластер», повышая стеклообразующую способность расплава. С использованием техники глубокого машинного обучения выполнена оценка зависимости температуры стеклования T_g от высокого давления: увеличение давления от 0 до 10 ГПа повышает T_g в 1.3 раза.

Полученные результаты вносят вклад в понимание процессов структурообразования, происходящих в стеклообразующих расплавах типа Al-ПМ-РЗМ в области эвтектики, а также в изучение влияния высокого давления на процессы их затвердевания. Более глубокое теоретическое исследование системы на основе машинного обучения для построения межатомного потенциала позволит учитывать в численном моделировании гораздо более длительные промежутки времени и непосредственно исследовать процессы затвердевания.

Благодарности. Авторы выражают признательность В. В. Бражкину за оказанное содействие в получении образцов в камере высокого давления типа «тороид».

Финансирование. Работа выполнена в рамках Проекта РНФ (№ 22-22-00674). Электронно-микроскопические исследования выполнены на оборудовании ЦКП «Центр физических и физико-химических методов анализа, исследования свойств и характеристик поверхности, наноструктур, материалов и изделий» УдмФИЦ УрО РАН, г. Ижевск. Образцы под высоким давлением получены в ИФВД РАН, г. Москва, г. Троицк. Численные расчеты выполнены с использованием вычислительных ресурсов федерального центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных для средств меганауки» НИЦ «Курчатовский институт» (<http://ckp.nrcki.ru/>), суперкомпьютеров Объединенного суперкомпьютерного центра РАН (ОАЦЦ РАН) и суперкомпьютера «Говорун» Многофункционального информационно-вычислительного комплекса ЛИИТ ОИЯИ (Дубна).

ЛИТЕРАТУРА

1. С. Г. Рассолов, Е. А. Свиридова, В. В. Максимов и др., *Металлофизика и новейшие технологии* **37**, 1089 (2015).
2. A. L. Belyukov, S. G. Menshikova, and V. I. L Adrianov, *J. Phys.: Cond. Matt.* **35**, 314001 (2023).
3. S. G. Menshikova, A. A. Sushkov, and V. V. Brazhkin, *Phys. Sol. St.* **64**, 204 (2022).
4. N. M. Chtchelkatchev, M. V. Magnitskaya, V. A. Sidorov et al., *Pure and Appl. Chem.* **91**, 941 (2019).
5. Г. Е. Абросимова, А. С. Аронин, *ФТТ* **59**, 2227 (2017).
6. A. V. Tsvyashchenko, L. N. Fomicheva, A. A. Sorokin et al., *Phys. Rev. B* **65**, 174513 (2002).
7. V. I. Levitas, *J. Phys.: Cond. Matt.* **30**, 163001 (2018).
8. V. P. Filonenko, P. V. Zinin, I. P. Zibrov et al., *Crystals* **8**, 448 (2018).
9. Yu. A. Sokolovskaya, V. V. Sokolovskiy, M.A. Zagrebin et al., *JETP* **125**, 104 (2017).
10. A. M. Satanin, *Introduction to the Density Functional Theory*, Teaching aid., Nizhny Novgorod (2009), p. 64.
11. Ф. М. Гафаров, А. Ф. Галимянов, *Искусственные нейронные сети и приложения*, Изд-во Казан. ун-та, Казань (2018).
12. Е. О. Хазиева, Н. М. Щелкачев, А. О. Типеев, Р. Е. Рыльцев, *ЖЭТФ* **164**, 980 (2023).
13. А.Ю. Чурюмов, Cand. ... Dr. Tech. Sciences, Moscow (2008).
14. L. V. Kamaeva, E. N. Tsiok, and N. M. Chtchelkachev, *J. Molec. Liquids* **393**, 123659 (2024).
15. L. N. Kolotova, G. E. Norman, and V. V. Pisarev, *J. Non-Crystalline Sol.* 429 (2015).
16. S. G. Menshikova, N. M. Chtchelkatchev, and V. V. Brazhkin, *Materialia* **28**, 101713 (2023).
17. V. V. Brazhkin, Cand. ... Dr. phys.-mat. Sciences, Moscow (1996).
18. S. G. Menshikova and V. V. Brazhkin, *Phys. Sol. St.* **64**, 197 (2022).
19. P. M. Larsen, S. Schmidt, and J. Schiotz, *Modelling and Simul. in Mater. Sci. Eng.* **24**, 055007 (2016).
20. D. Turnbull, *J. Appl. Phys.* **21**, 1022 (1950).
21. T. Schenk, D. Holland-Moritz, V. Simonet et al., *Phys. Rev. Lett.* **89**, 075507 (2002).
22. T. V. Tropin, G. Schulz, J. W. Schmelzer et al., *J. Non-Cryst. Solids* **409**, 63 (2015).
23. X. Guo, M. Potuzak, J.C. Mauro et al., *J. Non-Cryst. Solids* **357**, 3230 (2011).
24. H. B. Ke, P. Wen, and W.H. Wang, *AIP Adv.* **2**, 041404 (2012).
25. B. A. Rusanov, V. E. Sidorov, P. Svec et al., *Inorganic Materials* **56**, 14 (2020).
26. T. V. Tropin, J. W. P. Schmelzer, and V. L. Aksenov, *Physics-Uspekhi* **59** (2016).

ВАРИАЦИИ ОБМЕННОГО СМЕЩЕНИЯ И МАГНИТНАЯ АНИЗОТРОПИЯ ПЛЕНОЧНЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА FeMn

В. О. Васьковский^{a,b}, А. А. Быкова^{a}, А. Н. Горьковенко^a, М. Е. Москалев^a,
В. Н. Лепаловский^a*

^a *Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина
620002, Екатеринбург, Россия*

^b *Институт физики металлов им. М. Н. Митеева
Уральского отделения Российской академии наук
620990, Екатеринбург, Россия*

Поступила в редакцию 23 августа 2023 г.,
после переработки 28 декабря 2023 г.
Принята к публикации 3 января 2024 г.

Представлены результаты систематического экспериментального исследования гистерезисных свойств пленочных композитов типа FeNi/FeMn/FeNi в условиях варьирования толщины антиферромагнитного слоя FeMn, температуры и магнитной предыстории. Показано, что влияние указанных факторов на коэрцитивную силу и поле обменного смещения может быть объяснено на основе представлений о высокодисперсной поликристаллической структуре антиферромагнитного слоя. Реализована оригинальная методика оценки температурной зависимости константы магнитной анизотропии антиферромагнетика.

DOI: 10.31857/S0044451024050067

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние десятилетия значительное внимание в физике композитных материалов уделяется исследованию магнитных систем, в которые входят обменно-связанные между собой слои антиферромагнитных и ферромагнитных металлов. Обменное взаимодействие, возникающее между слоями, приводит к определенной корреляции их магнитных структур. А отсутствие у антиферромагнетика спонтанной намагниченности и соответственно реакции на относительно небольшое магнитное поле индуцирует в ферромагнетике однонаправленную магнитную анизотропию, проявляющуюся в сдвиге его петли гистерезиса по оси магнитного поля. Данный эффект, называемый обменным смещением, представляет интерес для таких перспективных научно-технических направлений, как спинтроника, магнитная сенсорика, магнитная обработка информации [1–4].

Впервые указанный эффект был обнаружен в 1956 году при исследовании однодоменных частиц Co, покрытых антиферромагнитным оксидом CoO [5, 6], и с тех пор накоплен большой объем информации по реализации и особенностям обменного смещения в различных ферро-/антиферромагнитных композитах [7–9]. Классическим примером композитов, демонстрирующих эффект обменного смещения, являются поликристаллические пленки типа FeMn/FeNi, содержащие ферромагнитный слой пермаллоя Fe₂₀Ni₈₀ и антиферромагнитный слой Fe₅₀Mn₅₀. Функциональные свойства данной структуры ограничены сравнительно низкой температурой блокировки ($T_b \leq 400$ K) [10]. Но у нее есть и свои достоинства, к которым можно отнести относительную простоту реализации обменного смещения, хорошую воспроизводимость его параметров и, конечно, отсутствие в составе антиферромагнетика дорогостоящих элементов типа Ir или Pt [11]. Изучению структуры типа FeMn/FeNi посвящено значительное число работ, в которых установлены закономерности формирования эффекта обменного смещения при варьировании толщин ферромаг-

* E-mail: nastyabykova@gmail.com

нитного и антиферромагнитного слоев, состава буферных слоев, шероховатости межслойных интерфейсов, температуры, магнитной предыстории и условий термомагнитной обработки [12–18]. В том числе, установлена роль эффекта эпитаксиального роста в реализации оптимальных кристаллической структуры и текстуры композитов; определены критические толщинные параметры слоистой структуры; выявлены особенности термически активируемой межслойной диффузии; показано, что многие характерные особенности гистерезисных свойств обусловлены дисперсией в размере кристаллитов антиферромагнитного слоя.

Таким образом, пленочные композиты FeMn/FeNi представляются неплохо изученным носителем эффекта обменного смещения и в этой связи могут рассматриваться как модельный объект, весьма подходящий для тестирования новых подходов к экспериментальному изучению подобных сред, а также построению их физических и компьютерных моделей. В том числе, представляет интерес оценка эффективности использования такого рода бислоев для косвенного определения константы магнитной анизотропии антиферромагнитной составляющей. Само по себе количественное описание анизотропии антиферромагнетиков является непростой задачей. Отсутствие спонтанной намагниченности предъявляет очень высокие требования к реализации традиционных методик, используемых в этой области. В их рамках для определения анизотропии намагничивания [19] или условий резонансного микроволнового поглощения [20] необходимы сверхсильные стационарные магнитные поля (напряженностью более 10^5 Э) и сверхвысокочастотное электромагнитное излучение (частотой более 10^2 ГГц), т.е. сложное экспериментальное оборудование. Ситуация осложняется тем, что для качественной интерпретации кривых намагничивания или составляющих эффективного магнитного поля, получаемых в результате применения указанных методик, в эксперименте должны использоваться монокристаллические образцы, причем достаточно большого объема. Несравненно более доступной является методика определения константы анизотропии антиферромагнетика, предложенная в работе [21] при изучении поликристаллических пленок типа IrMn/FeNi и известная под названием Йорк-протокол. Она основана на анализе зависимостей поля обменного смещения от магнитной предыстории образцов и позволяет определить константу анизотропии антиферромагнетика IrMn при одной фиксированной температуре.

Данная работа посвящена физическому обоснованию возможности применения Йорк-протокола для определения температурного поведения константы магнитной анизотропии антиферромагнетика, которое строится на подробном анализе эффекта обменного смещения в поликристаллических пленках типа FeMn/FeNi с разной толщиной антиферромагнитного слоя.

2. ОПИСАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ МЕТОДИК

Исследовались многослойные пленки стекло/Ta(5)/Fe₂₀Ni₈₀(5)/FeMn(L)/Fe₂₀Ni₈₀(40) с варьируемой толщиной антиферромагнитного слоя L, которые были получены методом магнетронного распыления на установке АТС Orion 8. Формирование пленочной структуры происходило путем последовательного распыления однокомпонентной (Ta) или сплавных мишеней соответствующего состава. Весь технологический процесс осуществлялся при давлении аргона 10^{-3} мм рт. ст. в присутствии однородного магнитного поля (технологическое поле) напряженностью 250 Э, ориентированного параллельно плоскости образцов, и при наличии на подложке высокочастотного электрического смещения мощностью 14 Вт.

В выбранном виде пленочных композитов слой Ta и следующий за ним слой пермаллоя (вспомогательный слой) толщиной по 5 нм имели структурообразующее назначение и в совокупности, благодаря эффекту эпитаксии, должны инициировать формирование кристаллитов FeMn с ГЦК-решеткой и кристаллической текстурой типа (111). Именно в такой структурной модификации FeMn проявляет антиферромагнетизм и является источником обменного смещения [22].

Внешний слой пермаллоя толщиной 40 нм (основной слой) являлся функциональным. Его гистерезисные свойства в основном использовались для индикации магнитного состояния слоя FeMn. Кроме того, в совокупности оба ферромагнитных слоя позволяли получить дополнительную информацию о закрепляющих свойствах разных поверхностей антиферромагнитного слоя. Предпосылкой для этого являлось значительное различие слоев пермаллоя по толщине, позволившее «развести» по величине поля их перемагничивания. Номинальная толщина слоя FeMn изменялась в пределах 2–20 нм и, как и для других слоев, контролировалась в составе пленочной структуры по времени и предварительно определенным скоростям осаждения металлов. По-

грешность такого способа аттестации оценивается нами в ± 0.2 нм.

Структурная характеристика полученных многослойных пленок выполнена на дифрактометре Bruker D8 ADVANCE в излучении $\text{Cu } K_\alpha$. Для аттестации пленок по магнитным свойствам при комнатной температуре и в интервале температур $5 \leq T \leq 400$ К использовались керр-магнитометр Evico magnetics и измерительный комплекс PPMS DynaCool T9 соответственно.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И КОММЕНТАРИИ

На рис. 1 приведены результаты дифрактометрии ряда образцов с различной толщиной слоя FeMn. На примере пленки с $L = 20$ по дифрактограмме, содержащей только два рефлекса, можно сделать заключение о наличии в ней двух основных фаз с ГЦК-решеткой, параметры a которых равны 0.3598 и 0.3541 нм. Их можно отождествить соответственно со слоями FeMn и FeNi, текстурированными по типу (111) и тем самым констатировать реализацию необходимого структурного состояния. Правда, с уменьшением L дифракционный рефлекс от FeMn становится менее выраженным и в конце концов перестает разрешаться. В то же время линия FeNi остается практически неизменной. Очевидно, что она формируется преимущественно внешним слоем пермаллоя с большей толщиной, а стабильность его структурного состояния указывает в том числе на наличие сквозной текстуры типа (111) во всех исследовавшихся образцах.

Общая характеристика магнитного состояния всей серии образцов может быть дана на основе

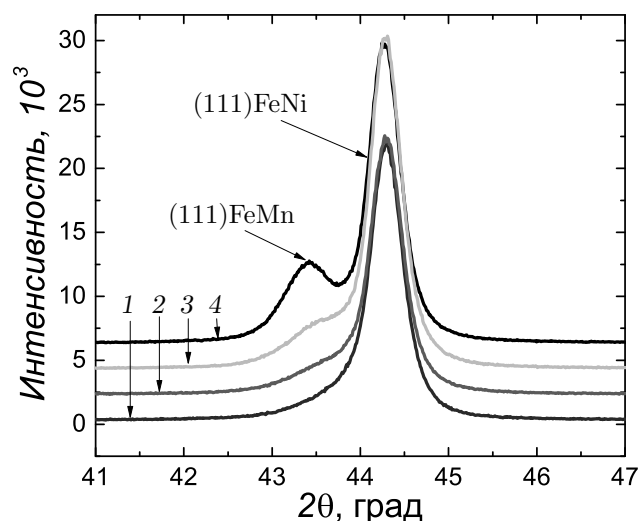


Рис. 1. Дифрактограммы пленочных структур с разной толщиной слоя FeMn: $L = 5$ (1), 7.5 (2), 10 (3), 20 (4) нм

рис. 2, на котором представлены зависимости коэрцитивной силы H_c (полуширина петли гистерезиса) и поля обменного смещения H_e (величина сдвига центра петли гистерезиса по оси полей) обоих слоев пермаллоя от толщины слоя FeMn. Значения указанных параметров определены из магнитооптических петель гистерезиса, измеренных при комнатной температуре с двух сторон пленок. Как известно, величина и знак поля H_e могут зависеть от магнитной предыстории образцов [23, 24]. Поэтому для определенности все измерения выполнены непосредственно после получения пленок, которое осуществлялось в технологическом поле условно отрицательного знака.

Представленные данные показывают, что слой FeMn начинает значительно проявлять себя при толщине более 2.5 нм, вызывая интенсивный рост коэрцитивной силы ферромагнитных слоев. Он продолжается в довольно узком интервале L , а затем сменяется более плавным снижением H_c с по-

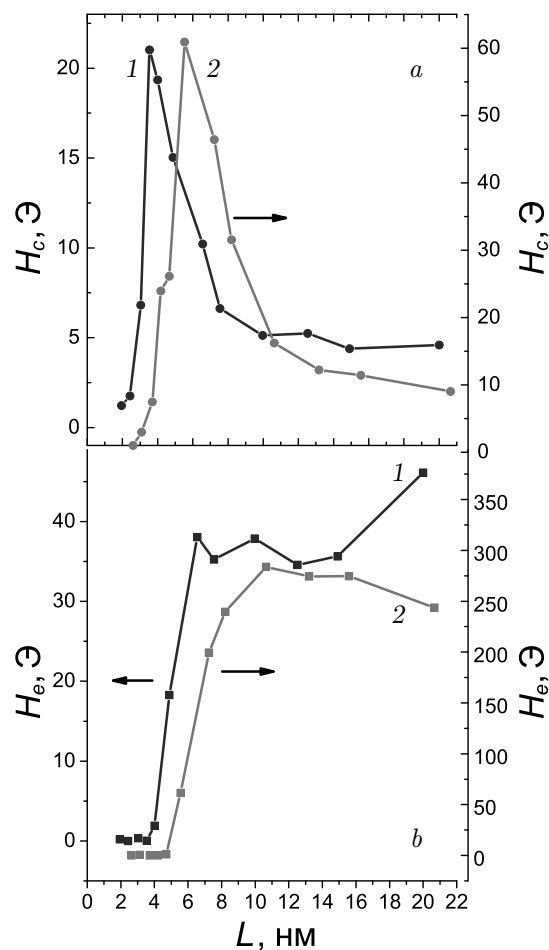


Рис. 2. Зависимости коэрцитивной силы (a) и поля обменного смещения (b) основного (кривые 1) и дополнительного (кривые 2) слоев пермаллоя от толщины слоя FeMn

следующим выходом на стабильный уровень, который, впрочем, значительно выше коэрцитивной силы, свойственной однослойным пленкам соответствующих толщин (порядка 1 Э). В целом зависимости $H_c(L)$ для основного и вспомогательного слоев FeNi качественно близки, но сильно различаются в количественном отношении. Последнее в большей мере можно отнести на счет разницы в толщине слоев и рассматривать как свидетельство наличия поверхностного источника задержки перемagnetничивания. Следует также отметить наличие определенного сдвига между двумя представленными кривыми по оси толщин. Он показывает запаздывание в формировании магнитного гистерезиса во вспомогательном слое по отношению к основному слою, которое, по-видимому, отражает различия в структурном сопряжении слоев.

Эффект обменного смещения появляется при $L > 4$ нм, причем практически синхронно в обоих ферромагнитных слоях. С увеличением толщины слоя FeMn поле обменного смещения H_e быстро возрастает, а затем в интервале 6–10 нм выходит на относительно стабильный уровень. Характерно, что во вспомогательном слое пермаллоя, как и для случая H_c , это происходит со сдвигом в сторону больших L . Соответствующим образом различаются и величины поля обменного смещения — для вспомогательного слоя конечный уровень H_e много выше, чем для основного слоя пермаллоя. Оценка константы межслойной связи K_s на разных интерфейсах показывает, что отмеченное различие практически в полной мере является следствием разнотолщинности ферромагнитных слоев. Вычисления, выполненные по формуле $K_s = H_e(L = 10 \text{ нм})M_sL_f$ [24], где M_s — спонтанная намагниченность пермаллоя (810 Гс), а L_f — толщина ферромагнитного слоя, дали значения 0.12 и 0.11 эрг/см² для основного и вспомогательного слоев соответственно. Таким образом, по эффективности обменной связи оба интерфейса близки, что является косвенным свидетельством однородности свойств слоя FeMn по толщине.

Описанные закономерности формирования H_c и H_e подобны тем, которые приведены в [7] для пленок типа Cu/FeNi/FeMn(L), и могут быть интерпретированы в рамках модели поликристаллического антиферромагнетика со слабым межкристаллитным обменом и обменно-связанным с ферромагнитными слоями. В ней важна устойчивость вектора антиферромагнетизма каждого кристаллита к тепловым флуктуациям и воздействию со стороны перемagnetничивающегося ферромагнитного слоя, с которым имеется прямая обменная связь. Такая устойчи-

вость определяется величиной энергии анизотропии, т. е. произведением константы анизотропии на объемом кристаллита. Исходя из этого, все кристаллиты слоя FeMn можно разбить на три категории: условно «суперпарамагнитные», «магнитонеустойчивые» и «стабильные». У первых температура блокировки меньше температуры измерений, и они практически не влияют на процесс перемagnetничивания ферромагнитных слоев. Вторые сами по себе находятся в устойчивом состоянии, но меняют ориентацию вектора антиферромагнетизма под действием ферромагнитных слоев. Такие кристаллиты формируют H_e , но не создают обменного смещения. И наконец, третьи обладают наибольшей устойчивостью магнитного состояния, на которое не влияют указанные выше воздействия. Именно они определяют H_e .

В рамках такого деления экспериментальные зависимости $H_c(L)$ и $H_e(L)$ можно интерпретировать, считая, что увеличение толщины антиферромагнитного слоя приводит к росту среднего объема кристаллитов и постепенному перераспределению их между указанными выше категориями. При $L < 2.5$ нм кристаллиты, если и есть, то при комнатной температуре находятся в «суперпарамагнитном» состоянии. В образцах с несколько большим L часть кристаллитов являются «магнитонеустойчивыми», что приводит к повышению коэрцитивной силы. Затем появляются кристаллиты третьей категории, которые обеспечивают обменное смещение. Характерно, что максимумы H_c (см. рис. 2) локализованы примерно на середине интервалов L , в которых происходит резкое изменение H_e ферромагнитных слоев. При таких толщинах, по-видимому, имеет место некий паритет в концентрациях «магнитонеустойчивых» и «стабильных» кристаллитов.

Представленная трактовка гистерезисных свойств пленок FeNi/FeMn/FeNi с разной толщиной антиферромагнитного слоя находит подтверждение в результатах температурных исследований. На рис. 3 показаны наиболее характерные зависимости $H_c(T)$ и $H_e(T)$ основного слоя пермаллоя для нескольких величин L . Они определены из магнитометрических петель гистерезиса при монотонном нагреве образцов от 5 до 300 К. Охлаждение до исходной температуры осуществлялось в условно отрицательном магнитном поле (соответствует знаку технологического поля) напряженностью 5 кЭ — состояние «N». В этом состоянии проводилась магнитная подготовка путем однократного циклического перемagnetничивания образцов в магнитном поле с амплитудой 5 кЭ. Затем при данной и последующих температурах измерялись петли гистерезиса,

параметры которых использовались для анализа. Переход от одной температуры к другой происходил в максимальном перемещающем поле (5 кЭ) отрицательного знака. Продолжительность одного цикла измерений, включая время установления температуры, составляло около 30 мин. Из рис. 3а видно, что при 5 К обменное смещение присутствует во всех исследованных образцах, а для $L \geq 3$ нм его эффективность практически не зависит от толщины слоя FeMn. В пленке с $L = 2$ нм величина H_e намного меньше, чем в других образцах. Это может быть следствием несплошности самого тонкого слоя FeMn или его частичной аморфизации, сопровождающейся переходом в парамагнитное состояние. Интересно, что кривые 1 и 2 имеют вогнутый характер, демонстрируя более резкое изменение $H_e(T)$ в области $T < 50$ К. В целом такой ход $H_e(T)$ можно трактовать как отражение сегрегации антиферромагнитных кристаллитов по размерам на две доминирующие группы с температурами блокировки 50 и 150 К. В остальных образцах зависимости $H_e(T)$ выпуклы и демонстрируют уменьшение температурной чувствительности поля обменного смещения с ростом L до 8 нм, после чего происходит толщинная стабилизация свойств.

Соответствующим образом ведет себя и коэрцитивная сила (рис. 3б). В образцах с малой L она в целом выше и показывает немонокотное изменение с температурой (кривые 2, 3, 4), в частности, наличие максимума, который смещается в область больших температур при увеличении L . При этом максимум локализуется в области температур, в которой появляется обменное смещение. В терминах введенной выше градации магнитного состояния кристаллитов FeMn это означает, что при понижении температуры значительная их часть последовательно переходит из категории «суперпарамагнитные» в категорию «магнитнестойчивые» и «стабильные». В соответствии с этим H_c сначала возрастает, а затем уменьшается. В образцах с $L \geq 10$ нм коэрцитивная сила в широком интервале температур изменяется мало (кривая 5), что говорит о принадлежности основной части антиферромагнитных кристаллитов к категории «стабильные». Но вблизи гелиевых температур ход $H_c(T)$ изменяется, показывая довольно резкий рост, причем во всех без исключения образцах.

Отсюда можно заключить, что в слоях FeMn практически всегда в той или иной мере присутствует ультратонкая суперпарамагнитная фаза с температурой блокировки 50 К, которая не дает вклада в обменное смещение, т. е. ее кристаллиты в прин-

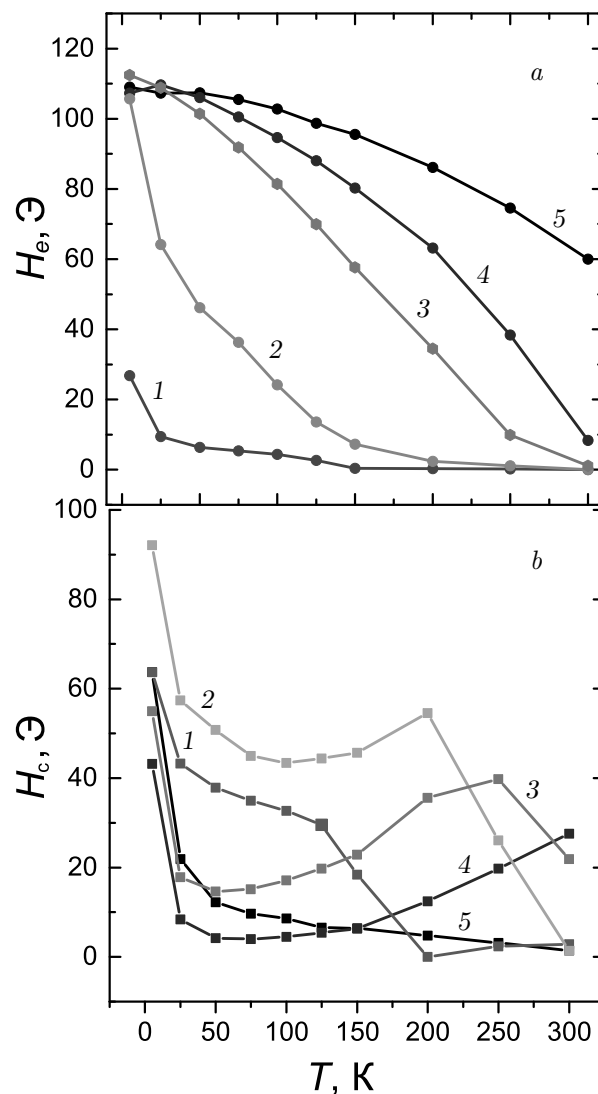


Рис. 3. Температурные зависимости поля обменного смещения (а) и коэрцитивной силы (б) основного слоя пермаллоя для пленок с различной толщиной слоя FeMn, полученные из состояния «N»: $L = 2$ (1), 3 (2), 4 (3), 5 (4), 20 (5) нм

ципе не переходят в категорию «стабильные». Существует также версия, что эту фазу составляют межкуристаллитные прослойки, находящиеся в состоянии типа «спиновое стекло» [25] с температурой замерзания менее 50 К. В дополнение отметим, что гистерезисные свойства вспомогательного слоя пермаллоя изменяются с температурой качественно аналогичным образом.

В продолжение данного эксперимента были проведены аналогичные температурные измерения гистерезисных свойств тех же образцов из исходного состояния, полученного охлаждением в магнитном поле другого знака (противоположен знаку технологического поля) — состояния «Р». В таком же

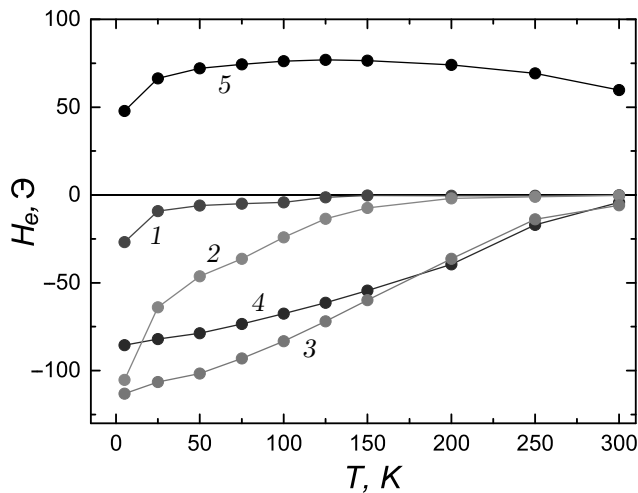


Рис. 4. Зависимости поля обменного смещения основного слоя пермаллоя от температуры для пленок с различной толщиной слоя FeMn, полученные из состояния «Р»: $L = 2$ (1), 3 (2), 4 (3), 5 (4), 20 (5) нм

поле находились образцы при варьировании температуры. Соответствующие зависимости $H_e(T)$ приведены на рис. 4. Как видно, они претерпели весьма значительные изменения по сравнению с данными, полученными в состоянии «N». Во всех образцах, не обладавших значительным обменным смещением при комнатной температуре ($L \leq 5$ нм), поле H_e приобрело иной знак при сохранении характера температурного поведения (кривые 1–4). Для пленок с большей L знак H_e сохранился, но зависимости $H_e(T)$ стали немонотонными (кривая 5). Все эти изменения укладываются в описанную выше модель структурно неоднородного антиферромагнетика. В образцах с $L \leq 5$ нм «суперпарамагнитные» и «магнитоустойчивые» кристаллиты, переходя при охлаждении в категорию «стабильные», фиксируют новое положение намагниченности ферромагнитного слоя, что приводит к соответствующему сдвигу его петли гистерезиса. При повышении температуры число таких кристаллитов на межслойном интерфейсе уменьшается, приводя к снижению абсолютной величины H_e . В пленках с более толстым слоем FeMn доля кристаллитов, меняющих свое состояние в зависимости от магнитной предыстории, относительно невелика. Поэтому в таких образцах при охлаждении поле обменного смещения не меняет знак, а только несколько уменьшается. Нагрев приводит к переходу этой части кристаллитов в категорию «магнитоустойчивые». Это инициирует рост H_e при повышении температуры в области $T < 100$ К. Отметим также, что температурные зависимости коэрцитивной силы, полученные в рамках данного эксперимента, практически полностью

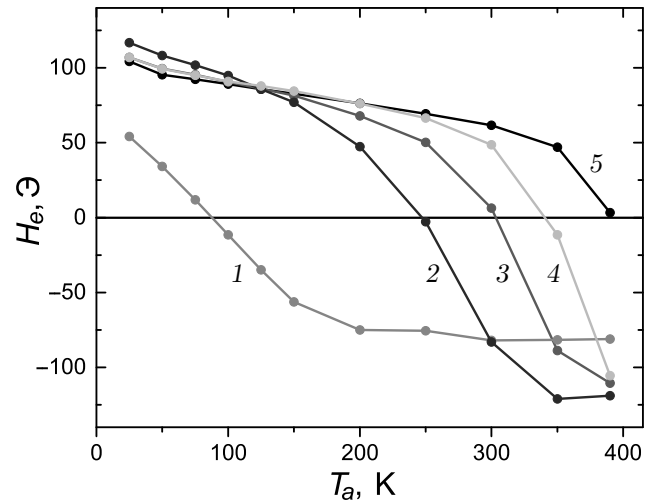


Рис. 5. Зависимости поля обменного смещения основного слоя пермаллоя от температуры активации для пленок с различной толщиной слоя FeMn: $L = 3$ (1), 5 (2), 7.5 (3), 10 (4), 20 (5) нм

воспроизводят данные, представленные на рис. 3b, и тем самым показывают слабую зависимость H_c от магнитной предыстории пленок.

Более детальная информация о связи структурного и магнитного состояний слоя FeMn может быть получена с привлечением оригинальной методики, предложенной в [21]. Она состоит в определении так называемой медианной температуры блокировки $\langle T_b \rangle$ и последующем вычислении на этой основе константы анизотропии антиферромагнетика. Йорк-протокол рассчитан на получение количественного результата и требует достаточно строгого соблюдения измерительных процедур, обеспечивающих протекание основных релаксационных процессов в магнитном состоянии пленок. В нашем случае измерения осуществлялись по следующему сценарию: охлаждение образца до 25 К в отрицательном магнитном поле (-5 кЭ) → магнитная подготовка → измерение петли гистерезиса → нагрев в положительном магнитном поле ($+5$ кЭ) до определенной температуры активации T_a , выдержка 1 ч (время активации), охлаждение до 25 К → магнитная подготовка → измерение петли гистерезиса → повторение измерительного цикла с нагревом до большей температуры активации. Величина T_a повышалась с шагом 25 К вплоть до температуры 400 К.

На рис. 5 приведены зависимости поля обменного смещения основного слоя пермаллоя от температуры активации для образцов с разной L . Как видно, все кривые являются монотонно убывающими и демонстрируют изменение знака H_e . Такое поведение $H_e(T_a)$ отражает тот факт, что часть антиферромагнитных кристаллитов, потерявшая устой-

чивость при повышенной температуре, возвращается в категорию «стабильные» при последующем понижении температуры, изменив ориентацию вектора антиферромагнетизма. Это происходит из-за обменного действия со стороны ферромагнитного слоя с иной по отношению к исходной ориентацией намагниченности. Температура активации, после нагрева до которой обменное закрепление со стороны двух групп кристаллитов с разной ориентацией вектора антиферромагнетизма уравнивается и H_e обращается в нуль, принимается за медианную температуру блокировки $\langle T_b \rangle$.

В целом зависимость $\langle T_b \rangle$ от толщины слоя FeMn показана на рис. 6a. Ее восходящий характер еще раз указывает на увеличение в среднем размера и соответственно энергии анизотропии антиферромагнитных кристаллитов, которая определяется выражением $E_a = KV$, где K — константа магнитной анизотропии антиферромагнетика, V — объем кристаллита. Информация о $\langle T_b \rangle$ позволяет оценить величину K , для чего вслед за авторами работы [21] можно воспользоваться соотношением

$$K(\langle T_b \rangle) = \frac{\ln(t f_0)}{\langle V \rangle} k \langle T_b \rangle,$$

где k — постоянная Больцмана, t — время магнитной релаксации, за которое было принято время активации (1 ч), f_0 — характеристическая частота переключения магнитного момента, которая по оценке [25] составляет $2.1 \cdot 10^{12}$ Гц, $\langle V \rangle$ — средний объем кристаллитов. Для определения $\langle V \rangle$ было принято приближение цилиндрических кристаллитов с высотой, равной толщине антиферромагнитных слоев, и фиксированной площадью основания. Основой для такого приближения являются известные данные о столбчатом характере микроструктуры металлических пленок, полученных методом магнетронного распыления [26]. Площадь сечения цилиндрических кристаллитов определялась по среднему диаметру, определенному из рентгенографических данных по формуле Шеррера [27]. Для этого была использована дифрактограмма 4 на рис. 1, в которой выделение линии FeMn осуществлено путем аппроксимации реальной кривой двумя гауссовыми функциями. В итоге получена величина 6 нм, которая и использовалась в расчетах.

Приведенная выше формула связывает вычисляемое значение константы анизотропии с конкретной величиной $\langle T_b \rangle$. Совокупность таких данных для набора $\langle T_b \rangle$, полученного на образцах с разной L по Йорк-протоколу (рис. 6a), фактически дает зависимость K от температуры [28]. Соответствующий

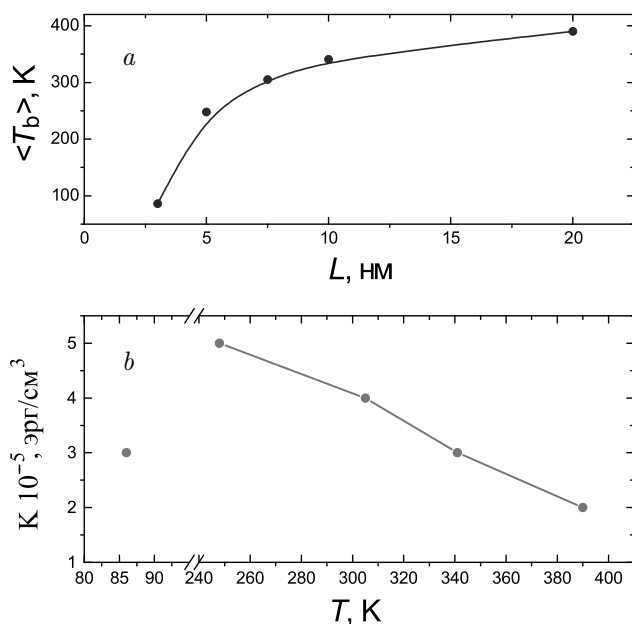


Рис. 6. Зависимости медианной температуры блокировки от толщины слоя FeMn (a) и константы магнитной анизотропии FeMn (b) от температуры

график приведен на рис. 6b. Как видно, зависимость $K(T)$ имеет монотонно убывающий характер, типичный для большинства магнитоупорядоченных веществ. Кроме того, по уровню величины полученные данные неплохо коррелируют с результатами, представленными в [29,30]. То и другое в определенной мере свидетельствует об адекватности использованного методического подхода. Исключение составляет результат, полученный для образца с $L = 3$ нм, имеющего вогнутую зависимость $H_e(T)$ (кривая 1 на рис. 5). Он показан на рис. 6b отдельной точкой. Вероятно, при этой и меньших толщинах антиферромагнитного слоя поликристаллическая модель его структурного состояния не является вполне приемлемой.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполненное исследование дает разностороннее подтверждение модели высокодисперсного поликристаллического антиферромагнетика, ответственного за формирование гистерезисных свойств, в том числе обменного смещения, в слоистых пленочных композитах типа ферромагнетик/антиферромагнетик/ферромагнетик. Показано, что экспериментально полученные зависимости коэрцитивной силы и поля обменного смещения от толщины антиферромагнитного слоя, температуры и магнитной предыстории находят качественное объяснение при варьировании соотношения трех категорий

антиферромагнитных кристаллитов: «суперпарамагнитные», «магнитонеустойчивые», «стабильные». Продemonстрировано, что применение специальной измерительной методики (Йорк-протокол) к образцам с разной толщиной антиферромагнитного слоя позволяет определить температурную зависимость константы магнитной анизотропии антиферромагнетика.

Благодарность. Авторы выражают благодарность Н. В. Селезневой за дифрактометрию исследованных образцов.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ, проект FEUZ 2023 0020.

ЛИТЕРАТУРА

1. X. Chen, A. Hochstrat, P. Borisov et al., Appl. Phys. Lett. **89**, 20 (2006).
2. C. H. Marrows, L. C. Chapon, and S. Langridge, Materials Today **12**, 70 (2009).
3. E. Lage, C. Kirchhof, V. Hrkac et al., Nature Materials **11**, 523 (2012).
4. J. Fassbender, S. Poppe, T. Mewes et al., Appl. Phys. A **77**, 51 (2003).
5. W. H. Meiklejohn and C. P. Bean, Phys. Rev. **102**, 1413 (1957).
6. E. D. Dahlberg, B. Miller, B. Hill et al., J. Appl. Phys. **83**, 6893 (1998).
7. K. H. J. Buschow, *Handbook of Magnetic Materials*, Elsevier, North-Holland (2015).
8. S. Erokhin, D. Berkov, and A. Michels, arXiv: 2309.17131.
9. J. A. Calderon, H. P. Quiroz, C. L. Teran et al., Sci. Rep. **13**, 722 (2023).
10. H. Sang, Y. W. Du, and C. L. Chien, J. Appl. Phys. **85**, 4931 (1999).
11. J. Kanak, T. Stobiecki, and S. van Dijken, IEEE Trans. Magn. **44**, 238 (2008).
12. P. Savin, J. Guzman, V. N. Lepalovskij et al., J. Magn. Magn. Mater. **402**, 49 (2016).
13. A. V. Svalov, G. V. Kurlyandskaya, V. N. Lepalovskij et al., Superlattices and Microstructures **83**, 216 (2015).
14. K. C. Chen, Y. H. Wuet et al., J. Appl. Phys. **101**, 9 (2007).
15. T. R. Gao, D. Z. Yang, S. M. Zhou et al., Phys. Rev. Lett. **99**, 057201 (2007).
16. K. Y. Kim, H. C. Choi, J. H. Shim et al., IEEE Trans. Magn. **45**, 2766 (2009).
17. M. F. Toney, C. Tsang, and H. Kent, J. Appl. Phys. **70**, 6227 (1991).
18. J. B. Youssef, D. Spenato, H. L. Gall et al., J. Appl. Phys. **91**, 7239 (2002).
19. Н. В. Мушников, *Магнетизм и магнитные фазовые переходы*, Изд-во Урал. унив. (2017).
20. А. Г. Гуревич, *Магнитный резонанс в ферритах и антиферромагнетиках*, Наука, Москва (1973).
21. K. O'Grady, L. E. Fernandez-Outon, and G. Vallejo-Fernandez, J. Magn. Magn. Mater. **322**, 883 (2010).
22. В. О. Васьковский, В. Н. Лепаловский, А. Н. Горьковенко и др., ЖТФ **85**, 118 (2015) [V. O. Vas'kovskiy, V. N. Lepalovskij, A. N. Gor'kovenko et al., J. Techn. Phys. **60**, 116 (2015)].
23. A. V. Svalov, E. V. Kudyukov, V. N. Lepalovskij et al., Current Appl. Phys. **23**, 68 (2021).
24. V. O. Vas'kovskiy, A. N. Gorkovenko, N. A. Kulesh et al., Bulletin Russ. Acad. Sci. Phys. **83**, 857 (2019).
25. N. A. Kulesh, M. E. Moskalev, V. O. Vas'kovskiy et al., Phys. Metals Metallogr. **122**, 855 (2021).
26. J. A. Calderon, P. Q. Cristian, L. Teran et al., Sci. Rep. **13**, 722 (2023).
27. P. Scherrer, Nach Ges Wiss Gottingen **2**, 8 (1918).
28. М. Е. Москалев, Дисс. ... канд. физ.-матем. наук, УрФУ, Екатеринбург (2021).
29. J. De Clercq, A. Vansteenkiste, M. Abes et al., J. Phys. D: Appl. Phys. **49**, 435001 (2016).
30. N. Koichi, H. Chunghong, F. Hideo et al., J. Appl. Phys. **80**, 4528 (1996).

ВЛИЯНИЕ ОДНОРОДНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА ВИХРЕПОДОБНЫЕ МАГНИТНЫЕ СТРУКТУРЫ В ПЕРФОРИРОВАННЫХ ПЛЕНКАХ

Е. Б. Магадеев^{}, Р. М. Вахитов^{**}*

*Уфимский университет науки и технологий
450076, Уфа, Россия*

Поступила в редакцию 26 октября 2023 г.,
после переработки 27 декабря 2023 г.
Принята к публикации 28 декабря 2023 г.

Исследуются проявления флексомагнитоэлектрического эффекта в тонких ферромагнитных пленках с одноосной анизотропией типа «легкая плоскость» и искусственно созданными перфорациями при наличии внешнего электрического поля, нормального к плоскости пленки. Показано, что влияние неоднородного магнитоэлектрического взаимодействия в этом случае приводит к трансформации магнитных структур, которая обязательно сопровождается отклонением вектора намагниченности от плоскости образца. Для тех случаев, когда углы отклонения оказываются небольшими, получены явные выражения, описывающие распределение намагниченности. Доказано, что воздействие электрического поля определенной силы может приводить к изменению топологии основного состояния системы. Рассмотрена упрощенная модель, объясняющая особенности изменения структур такого типа, а также позволяющая установить условия их реализации.

DOI: 10.31857/S0044451024050079

1. ВВЕДЕНИЕ

Несмотря на то, что в последние годы полупроводниковая электроника практически вытеснила устройства, функционирующие на магнитных принципах, исследования в области дизайна магнитных материалов нисколько не утрачивают своей актуальности. Интерес к этой теме обусловлен, в частности, глубоким и всесторонним изучением вихреподобных объектов (скирмионов, бимеронов, цилиндрических магнитных доменов и т. д. [1–5]), которые считаются перспективными для создания устройств микро- и нанoeлектроники нового поколения [6–8] благодаря своим наноразмерам, топологической защищенности, высокой подвижности и т. д. [3, 5, 6]. Тем не менее ряд вопросов, важных для применения объектов такого типа на практике, остается нерешенным, и не в последнюю очередь это относится к проблемам устойчивости и управляемости

вихреподобных структур [9], особенно при комнатных температурах. Так, в большинстве работ, посвященных данной тематике (см., например, [1]), в качестве ключевого фактора, обеспечивающего стабильность изучаемых нанообъектов, рассматривается взаимодействие Дзялошинского – Мория, которое становится существенным только при низких температурах [10, 11]. В то же время в наноструктурированных пленках оно проявляется уже при комнатных температурах, однако при столь малых масштабах (~ 1 нм) будут возникать флуктуации, нарушающие тонкий баланс взаимодействий, ответственных за устойчивость вихреподобных неоднородностей [9]. Кроме того, параметр взаимодействия Дзялошинского – Мория является, по сути, фиксированной характеристикой материала, что существенно ограничивает возможности управления структурами, формирующимися под влиянием данного взаимодействия. В этом смысле более привлекательной альтернативой является неоднородное магнитоэлектрическое взаимодействие (НМЭВ) [12, 13], которое на феноменологическом уровне описания схоже с взаимодействием Дзялошинского – Мория [1], однако напрямую зависит от величины приложен-

^{*} E-mail: magadeev@yandex.ru

^{**} E-mail: VakhitovRM@yahoo.com

ного электрического поля и полностью исчезает в отсутствие поля. Сравнительно невысокий интерес к НМЭВ до недавнего времени объясняется, по всей видимости, тем, что связанный с ним флексомагнитоэлектрический эффект наблюдается в довольно узком классе магнитных материалов [14–16]; кроме того, природа данного явления до сих пор остается предметом дискуссий [17, 18]. Тем не менее возможность эффективного управления доменной структурой посредством НМЭВ уже получила ряд подтверждений экспериментального характера [14, 19], а теоретические исследования указывают на применимость данного подхода также и к управлению вихреподобными нанообъектами [20]. При этом под эффективностью управления в первую очередь надо понимать энергоэффективность, связанную с меньшими энергозатратами на создание электрических полей по сравнению с магнитными полями [19].

В работах [21–23] были рассмотрены перфорированные ферромагнитные пленки с сильной одноосной анизотропией типа «легкая плоскость» и показано, что в области двух или более близкорасположенных отверстий такой пленки возможна локализация топологически защищенных вихреподобных объектов, которые могут использоваться для записи и хранения информации в троичной системе счисления (позже в [24] был предложен также альтернативный способ записи информации на многосвязных образцах с легкоплоскостной анизотропией, однако лишь в двоичной системе). Для переключения между неэквивалентными состояниями этих объектов могут использоваться импульсы как магнитного [25], так и, по всей видимости, электрического поля. На последнее указывают результаты исследования [20] (а также аналогичные рассуждения в работе [26] в отношении мультиферроиков, где роль НМЭВ играло «обычное» магнитоэлектрическое взаимодействие), в котором изучалось влияние НМЭВ на распределение намагниченности в образце с одним отверстием (очевидно, такая модель подходит также и для описания образца с несколькими отверстиями, размеры которых малы по сравнению с расстоянием между ними [23]), причем величина константы легкоплоскостной анизотропии принималась бесконечно большой, так что вектор намагниченности не мог выходить из плоскости пленки. Для этого случая было показано, что воздействие поля заряженной нити, пропущенной через отверстие, приводит к формированию устойчивых структур различной топологии, в то время как однородное электрическое поле вообще не влияет на распределение намагниченности. Ясно, однако, что

последнее утверждение может оказаться несправедливым при конечных значениях константы анизотропии, поскольку появление некруговых траекторий вектора намагниченности существенно усложняет характер НМЭВ. Изучению связанных с этим явлений и посвящена данная работа.

2. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Рассмотрим ферромагнитную пленку малой толщины h , содержащую круглое отверстие радиусом R , и введем цилиндрическую систему координат (r, ϕ, z) , как показано на рис. 1 (ось z при этом нормальна к плоскости пленки). Будем описывать направление единичного вектора намагниченности $\mathbf{m}$ углами α и θ , первый из которых задает выход вектора $\mathbf{m}$ из плоскости пленки, а второй — ориентацию его проекции на плоскость, так что

$$\mathbf{m} = (-\sin(\theta - \phi) \cos \alpha, \cos(\theta - \phi) \cos \alpha, \sin \alpha). \quad (1)$$

Пусть образец находится в однородном электрическом поле напряженностью $\mathbf{E} \parallel z$. Тогда с учетом НМЭВ и одноосной анизотропии типа «легкая плоскость», ось которой параллельна оси z , полную энергию магнетика можно представить в виде

$$W = \int_0^{2\pi} \int_R^\infty \Phi h r dr d\phi, \quad (2)$$

где плотность энергии Φ определяется следующим образом [13, 23]:

$$\Phi = A [(\nabla \alpha)^2 + \cos^2 \alpha (\nabla \theta)^2] + K \sin^2 \alpha + M_s^2 \mathbf{E} (b_1 \mathbf{m} \operatorname{div} \mathbf{m} + b_2 \mathbf{m} \times \operatorname{rot} \mathbf{m}). \quad (3)$$

Здесь A — обменный параметр, K — абсолютная величина константы анизотропии, M_s — намагниченность насыщения, а b_1 и b_2 — константы НМЭВ. Заметим, что в выражениях (2) и (3) не включены явно члены, отвечающие вкладу размагничивающих полей. Это связано с тем, что в тонких пленках их влияние по большей части сводится к появлению анизотропии формы [27], которая при необходимости может быть учтена заменой величины константы K на ее эффективное значение $K + 2\pi M_s^2$. Плоскостные же компоненты размагничивающих полей лишь незначительно искажают распределение намагниченности [22], что не меняет картины наблюдаемых явлений даже в тех случаях, когда кристаллическая анизотропия практически отсутствует, и наличие легкой плоскости обеспечивается исключительно анизотропией формы [28]. Подставляя (1)

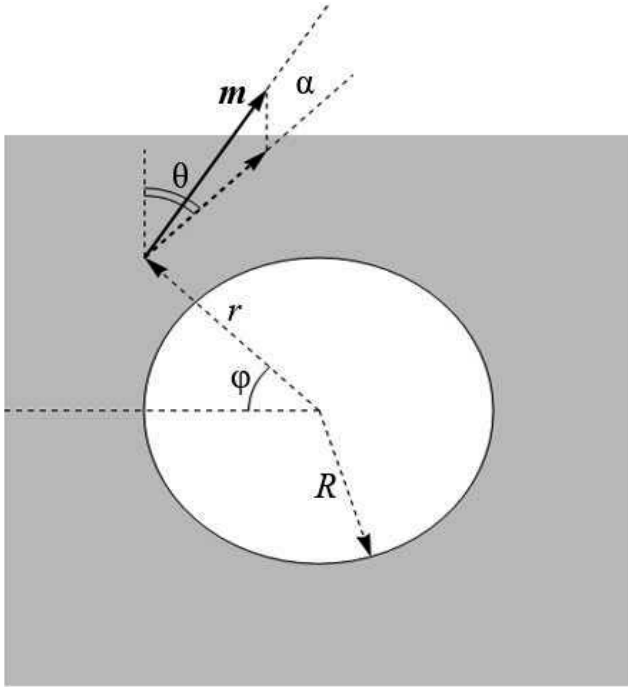


Рис. 1. Геометрия задачи

в (3) и приравнивая нулю вариационные производные функционала (2) по функциям α и θ , получаем следующие уравнения Эйлера – Лагранжа, которым должны удовлетворять минимумы энергии системы [27]:

$$A [2\Delta\alpha + \sin 2\alpha (\nabla\theta)^2] - K \sin 2\alpha + \beta \cos^2 \alpha \left[\sin(\theta - \phi) \frac{1}{r} \frac{\partial\theta}{\partial\phi} + \cos(\theta - \phi) \frac{\partial\theta}{\partial r} \right] = 0, \quad (4a)$$

$$A [2\Delta\theta - 4 \operatorname{tg} \alpha \nabla\theta \nabla\alpha] - \beta \left[\sin(\theta - \phi) \frac{1}{r} \frac{\partial\alpha}{\partial\phi} + \cos(\theta - \phi) \frac{\partial\alpha}{\partial r} \right] = 0, \quad (4b)$$

где

$$\beta = \beta_1 + \beta_2, \quad \beta_1 = b_1 M_s^2 E, \quad \beta_2 = b_2 M_s^2 E.$$

Данную систему уравнений необходимо дополнить граничными условиями. Во-первых, на границе отверстия должны обращаться в нуль производные плотности энергии (3) по $\partial\alpha/\partial r$ и $\partial\theta/\partial r$, т.е. при $r = R$ имеем

$$2A \frac{\partial\alpha}{\partial r} + (\beta_1 \sin^2 \alpha + \beta_2 \cos^2 \alpha) \sin(\theta - \phi) = 0, \quad (5a)$$

$$2A \frac{\partial\theta}{\partial r} - \beta_1 \operatorname{tg} \alpha \cos(\theta - \phi) = 0. \quad (5b)$$

Во-вторых, будем полагать, что на большом удалении от отверстия выход вектора намагниченности из плоскости пленки исчезает, так что $\alpha(r \rightarrow \infty) = 0$.

Данное условие позволяет исключить из рассмотрения нелокализованные структуры с квазипериодическим распределением намагниченности [15], которые по аналогии с киральными магнетиками могли бы формироваться и в образцах изучаемого типа при воздействии полями $\mathbf{E}$ достаточной величины.

Пусть для начала внешнее поле отсутствует. Тогда $\beta = 0$, и система уравнений (4a), (4b) имеет формальное решение

$$\alpha = 0, \quad \theta = \theta_0 = k\phi + \phi_0, \quad (6)$$

где k — целое число, а ϕ_0 — произвольная константа. В [23] было показано, что решения типа (6) отвечают минимумам энергии (2) при условии

$$K > A \left(\frac{c_{|k|}}{R} \right)^2, \quad (7)$$

где $c_0 = 0$, $c_1 = 0.320$, $c_2 = 1.066$, $c_3 = 1.902$ и т.д. При этом величина k нумерует топологически неэквивалентные состояния магнетика [21], которые тем самым оказываются долгоживущими даже при $k \neq 0$, несмотря на то, что глобальный минимум энергии системы заведомо достигается при однородном распределении намагниченности $k = 0$.

В результате включения поля $\mathbf{E}$ распределение намагниченности уже не будет описываться соотношениями типа (6). Тем не менее в тех случаях, когда угол α не достигает значений $\pm\pi/2$ ни в одной из точек образца, состояния магнетика по-прежнему можно характеризовать величиной k , понимая под ней число оборотов, совершаемых проекцией вектора $\mathbf{m}$ на плоскость пленки при полном обходе вокруг отверстия по часовой стрелке. При этом, разумеется, уже некорректно говорить о топологической неэквивалентности состояний с различными значениями k , а условия устойчивости (7) становятся недостаточными. Более того, локализованные структуры с наперед заданным k могут вообще не существовать при определенных значениях напряженности E . Ясно, однако, что в большинстве процессов, связанных с незначительным изменением поля $\mathbf{E}$, величина k будет сохраняться, что и обуславливает удобство ее использования при дальнейшем анализе.

Отметим, что решения типа (6) при $k \neq 0$ отвечают магнитным структурам, которые, вообще говоря, не являются уединенными неоднородностями. Тем не менее при наличии в пленке второго отверстия, магнитная структура в окрестности которого характеризуется величиной $-k$, распределение намагниченности на удалении от обоих отверстий оказывается однородным (точнее говоря, значения уг-

ла θ приближаются к некоторому пределу по закону r^{-1} , а плотность энергии Φ убывает по закону r^{-4} [21]). То же верно и для произвольного числа отверстий с нулевым суммарным значением величин k [22]. В этой связи структуры, описываемые системой уравнений (4а), (4б), также следует воспринимать как составляющие более крупной уединенной неоднородности, хотя для каждой из них в отдельности предел $\theta(r \rightarrow \infty)$ может и не существовать. Этим, в частности, объясняется отсутствие условия для угла θ аналогичного $\alpha(r \rightarrow \infty) = 0$.

3. ПРИБЛИЖЕНИЕ СИЛЬНОЙ АНИЗОТРОПИИ

Из вида системы уравнений (4а), (4б) ясно, что при $K \rightarrow \infty$ ее решения выражаются соотношениями (6) даже при наличии внешнего поля ($\beta \neq 0$). Пусть далее величина K является конечной, но большой, так что, по крайней мере, $K \gg A/R^2$, и условие (7) выполняется со значительным запасом. Резонно предположить, что и в этом случае распределение намагниченности в ненулевом поле будет описываться выражениями близкими к (6), благодаря чему становится возможно воспользоваться теорией возмущений, представляя углы α и θ в виде рядов по степеням малого параметра K^{-1} (поскольку данный параметр не является безразмерным, точный смысл требования его малости будет установлен позже). Положим $\theta = \theta_0 + \theta_1$, причем $\theta_1 \sim \alpha \sim K^{-1}$. Тогда, сохраняя в уравнении (4а) только немалые члены, сразу получаем

$$\alpha = \frac{k\beta \sin[(k-1)\phi + \phi_0]}{2Kr}. \quad (8)$$

Заметим, что данный результат, казалось бы, противоречит граничному условию (5а). В действительности его выполнение будет обеспечиваться быстрым изменением угла α в небольшой окрестности границы отверстия, которая имеет ширину порядка $\sqrt{A/K}$ и, соответственно, полностью исчезает в рамках изучаемого приближения. По той же причине на основании формулы (8) неверно делать вывод об отсутствии выхода вектора намагниченности из плоскости пленки при $k = 0$: несложно видеть, что однородное распределение вида $\alpha = 0$, $\theta = \text{const}$ на самом деле не может удовлетворять условию (5а) при $\beta_2 \neq 0$. Тем не менее при наличии сильной анизотропии масштабы формирующейся неоднородности оказываются исчезающе малыми.

Выражение для плотности энергии (3) с точностью до членов порядка K^{-1} , вообще говоря, содержит слагаемое, зависящее от θ_1 . Будучи пропорци-

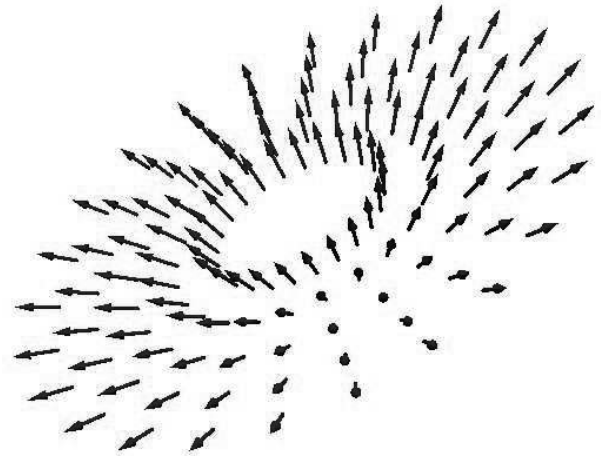


Рис. 2. Схематическое изображение направлений вектора намагниченности в различных точках образца в случае $k = 1$ в ненулевом внешнем поле

ональным $\partial\theta_1/\partial\phi$, это слагаемое, однако, дает нулевой вклад в интеграл (2), поэтому целесообразно ввести в рассмотрение величину Φ , усредненную по углам ϕ от 0 до 2π . С учетом формулы (8) эта величина не зависит от вида функции θ_1 и оказывается равна

$$\langle \Phi \rangle = \begin{cases} \frac{k^2 A}{r^2} \left(1 - \frac{\beta^2}{8AK} \right), & k \neq 1, \\ \frac{A}{r^2} \left(1 - \frac{\beta^2 \sin^2 \phi_0}{4AK} \right), & k = 1. \end{cases} \quad (9)$$

Из данного соотношения следует, что при $k = 1$ вырождение по углу ϕ_0 снимается полями сколь угодно малой величины E . При этом устойчивыми становятся структуры с $\phi_0 = \pm\pi/2$, что соответствует радиальному направлению проекции вектора $\mathbf{m}$ на плоскость образца (см. рис. 2). В то же время распределение $\alpha = 0$, $\theta = \phi$, которое при произвольных значениях параметров K и β формально удовлетворяет как уравнениям (4а), (4б), так и условиям (5а), (5б), не реализуется при $\beta \neq 0$, так как $\phi_0 = 0$ не минимизирует плотность энергии (9), а максимизирует.

Подставляя (8) в уравнение (4б), с точностью до членов порядка K^{-1} имеем

$$\Delta\theta_1 = \frac{k(k-2)\beta^2 \sin 2[(k-1)\phi + \phi_0]}{8AKr^2}. \quad (10)$$

В том же приближении условие (5б) на границе $r = R$ принимает вид

$$\frac{\partial\theta_1}{\partial r} = \frac{k\beta\beta_1 \sin 2[(k-1)\phi + \phi_0]}{8AKR}. \quad (11)$$

При $k = 1$ правые части выражений (10) и (11) с учетом $\phi_0 = \pm\pi/2$ обращаются в нуль, вследствие

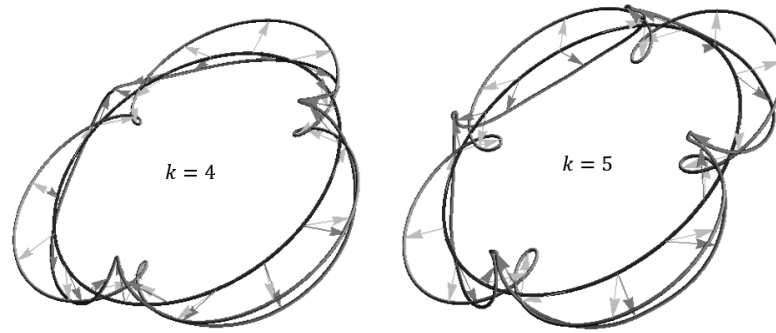


Рис. 3. Схематическое изображение распределения намагниченности в зависимости от угла ϕ при двух различных значениях k . Синим цветом показана окружность $r = \text{const}$, в точках которой рассматриваются направления намагниченности. Зеленым цветом показаны положения концов вектора намагниченности в том случае, когда электрическое поле отсутствует, и вектор намагниченности не выходит из плоскости пленки, а красным — в том случае, когда поле включено. Зеленые и красные стрелки иллюстрируют направление вектора намагниченности в отдельных точках окружности для обоих случаев

чего $\theta_1 = 0$. Отсюда, подытоживая формулы (6), (8) и (9), получаем

$$\alpha = \pm \frac{\beta}{2Kr}, \quad \theta = \phi \pm \frac{\pi}{2}, \quad \langle \Phi \rangle = \frac{A}{r^2} \left(1 - \frac{\beta^2}{4AK} \right). \quad (12)$$

При $k \neq 1$ ограниченное решение уравнения (10), удовлетворяющее условию (11), выглядит следующим образом:

$$\theta_1 = -\frac{k\beta \sin 2[(k-1)\phi + \phi_0]}{32(k-1)^2 AK} \times \left[(k-2)\beta + 2|k-1|\beta_1 \left(\frac{R}{r} \right)^{2|k-1|} \right]. \quad (13)$$

Из формул (8) и (13) следует, что включение поля $\mathbf{E}$ не меняет симметрию магнитной структуры типа (6), заключающуюся в существовании поворотной оси порядка $|k-1|$ (см. рис. 3). При этом, однако, распределение намагниченности оказывается отличным от (6) даже на большом удалении $r \gg R$ от отверстия. Действительно, поправка (13) в отличие от угла (8) имеет при $r \rightarrow \infty$ ненулевой предел, а значит, во всем объеме образца, кроме небольшой окрестности отверстия, вектор намагниченности повернется на некоторый угол, при этом практически не выходя из плоскости. Исключение составляет структура, отвечающая $k=2$, в случае которой поправка (13) с ростом r все же убывает до нуля по закону r^{-2} . Данное обстоятельство является частным следствием того факта, что предел $|\theta_1|$ при $r \rightarrow \infty$, как несложно убедиться, определяется величиной $|k-1|$. Таким образом, для $k=2$ этот предел должен быть ровно таким же, как и для $k=0$.

Заметим, что выполнение указанного выше условия $K \gg A/R^2$ еще не гарантирует корректности рассмотренного приближения, поскольку

данное условие устанавливает соотношение только между анизотропией и обменным взаимодействием, но никак не затрагивает НМЭВ. В результате величина β (для простоты будем считать β_1 и β величинами одного порядка) может оказаться настолько большой, что поправки (8) и (13) уже не будут носить характер возмущений. Их малость обеспечивается дополнительным условием $K \gg \beta^2/A$, которое должно проверяться наряду с $K \gg A/R^2$. Заметим, что при $|\beta| \approx A/R$ эти условия становятся эквивалентными.

4. ПРИБЛИЖЕНИЕ СЛАБЫХ ПОЛЕЙ

В рамках рассмотренного выше приближения сильной анизотропии возможность применения теории возмущений обеспечивалась тем, что вектор $\mathbf{m}$ не может значительно отклониться от ярко выраженной легкой плоскости даже при существенных значениях приложенного поля $\mathbf{E}$. Если, однако, ограничиться рассмотрением слабых полей, то возникающее под их влиянием распределение намагниченности должно быть близким к распределению (6) даже при умеренных значениях константы K , удовлетворяющих условию (7). В этом случае роль малого параметра играют величины β и β_2 (количественные условия их малости будут установлены далее), пропорциональные напряженности E . Полагая $\theta_1 \sim \alpha \sim \beta \sim \beta_2$, вместо уравнения (4а) с точностью до членов порядка β имеем

$$\Delta\alpha + \left(\frac{k^2}{r^2} - \frac{K}{A} \right) \alpha = -\frac{k\beta \sin[(k-1)\phi + \phi_0]}{2Ar}, \quad (14)$$

а вместо граничного условия (5а) при $r=R$

$$\frac{\partial\alpha}{\partial r} = -\frac{\beta_2 \sin[(k-1)\phi + \phi_0]}{2A}. \quad (15)$$

С той же точностью из (4b) получаем уравнение Лапласа $\Delta\theta_1 = 0$, а из (5b) — условие обращения производной $\partial\theta/\partial r$ в нуль на границе отверстия. Таким образом, в рамках рассматриваемого приближения $\theta_1 \equiv 0$, т.е. поправка θ_1 , как и в случае соотношения (13), пропорциональна β^2 .

Из вида выражений (14) и (15) следует, что

$$\alpha = \tilde{\alpha}(r) \sin[(k-1)\phi + \phi_0],$$

где $\tilde{\alpha}(r)$ описывает, таким образом, радиальную зависимость угла $\alpha(r, \phi)$ и представляет собой ограниченное при $r \rightarrow \infty$ решение уравнения

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha}'' + \frac{1}{r}\tilde{\alpha}' + \left(\frac{2k-1}{r^2} - \frac{K}{A}\right)\tilde{\alpha} &= -\frac{k\beta}{2Ar}, \\ \tilde{\alpha}'(R) &= -\frac{\beta_2}{2A}. \end{aligned} \quad (16)$$

Очевидно, что при $k \neq 1$ значение ϕ_0 может быть произвольным. При $k = 1$ выражение (2) с точностью до членов порядка β^2 может быть представлено в виде

$$W = W^{(0)} + \sin^2 \phi_0 W^{(1)},$$

где $W^{(0)}$ не зависит ни от ϕ_0 , ни от $\tilde{\alpha}(r)$, а $W^{(1)}$ является функционалом от функции $\tilde{\alpha}(r)$. При этом функционал $W^{(1)}$ обращается в нуль при $\tilde{\alpha} \equiv 0$, но эта функция не отвечает условию его экстремума. Следовательно, $W^{(1)}$ наверняка может принимать отрицательные значения, и минимум энергии W , как и в случае приближения сильной анизотропии, достигается при $\phi_0 = \pm\pi/2$, когда $\alpha = \pm\tilde{\alpha}(r)$ (см. рис. 2).

Введем в рассмотрение следующую функцию, которая является решением уравнения (16) при $\beta = 0$, $\beta_2 = \sqrt{AK}$:

$$\begin{aligned} F(r) &= \\ &= \frac{Q_{\sqrt{1-2k}}\left(\sqrt{\frac{K}{A}}r\right)}{Q_{-1+\sqrt{1-2k}}\left(\sqrt{\frac{K}{A}}R\right) + Q_{1+\sqrt{1-2k}}\left(\sqrt{\frac{K}{A}}R\right)}, \end{aligned} \quad (17)$$

где Q — модифицированная функция Бесселя второго рода (более привычное обозначение K для этой функции не используется здесь во избежание путаницы с ранее введенным обозначением для константы анизотропии). Тогда в силу линейности уравнения (16) его решение в общем случае имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha}(r) &= \frac{\beta_2}{\sqrt{AK}}F(r) + \\ &+ \frac{\beta}{\sqrt{AK}} \left[\tilde{\alpha}_0(r) + 2\sqrt{\frac{A}{K}}\tilde{\alpha}'_0(R)F(r) \right], \end{aligned} \quad (18)$$

где $\tilde{\alpha}_0(r)$ — частное решение (16) при $\beta = \sqrt{AK}$ и произвольном значении β_2 .

Первое слагаемое в правой части выражения (18) обусловлено влиянием НМЭВ на границе отверстия и быстро убывает с ростом r . Тем не менее его вклад становится определяющим, если $\beta = 0$ ($b_1 = -b_2$) или $k = 0$ (вследствие чего $\tilde{\alpha} \equiv 0$). Кроме того, благодаря наличию этого слагаемого при $\beta_2 \neq 0$ выход вектора намагниченности из плоскости пленки будет наблюдаться при произвольных значениях k , включая $k = 0$, т.е. даже однородное распределение намагниченности будет искажаться в результате включения поля **Е**. Примечательно, что обсуждаемый краевой эффект не исчезает в том числе и при выполнении условия сильной анизотропии, $K \gg A/R^2$. Действительно, в этом случае величина $F(R)$, согласно (17), стремится к пределу $1/2$, а значит, угол α должен достигать у границы отверстия значения $\beta_2/2\sqrt{AK}$, что, вообще говоря, значительно превышает углы отклонения от плоскости, определяемые формулой (8). Тем не менее экспоненциальный характер убывания функции (17) приводит к тому, что уже на расстоянии в несколько $\sqrt{A/K} \ll R$ от границы отверстия влияние краевого эффекта становится незаметным, и значения угла α резко снижаются.

Асимптотическое поведение решения (18) при $r \rightarrow \infty$ определяется видом частного решения $\tilde{\alpha}_0(r)$. В то же время из уравнения (14) можно сделать вывод, что даже при умеренных значениях K асимптотическое поведение угла α на большом удалении от отверстия описывается соотношением (8). Это позволяет положить

$$\tilde{\alpha}_0 \approx \frac{k}{2r}\sqrt{\frac{A}{K}},$$

откуда вместо (18) имеем следующее приближенное решение уравнения (16):

$$\tilde{\alpha}(r) = \frac{\beta_2}{\sqrt{AK}}F(r) + \frac{k\beta}{2Kr} - \frac{k\beta}{R^2}\sqrt{\frac{A}{K^3}}F(r). \quad (19)$$

На рис. 4 приведены графики зависимости $\tilde{\alpha}(r)$, полученные в результате численного решения уравнения (16) при $\beta_1 = \beta_2$, $k = \pm 1$ и различных значениях K , а также графики функции (19) при тех же значениях параметров. Несложно видеть, что приближенное выражение (19) отражает особенности поведения функции $\tilde{\alpha}(r)$ вполне корректно, причем точность приближения, как и следовало ожидать, увеличивается с ростом величины K . В частности, в случае $k = 1$ наибольшая относительная ошибка, которая достигается при $r \approx 1.4R$, составляет 13%

при $KR^2/A = 5$, но уже при $KR^2/A = 20$ становится менее 4%. Следует отметить, что при значениях отношения $KR^2/A \geq 20$ точностью не хуже 4% обладает не только формула (19), но также и соотношение $F(R) \approx 1/2$. Это позволяет записать следующее приближенное выражение для значений угла α , достигаемых на границе отверстия:

$$\alpha_m = \tilde{\alpha}(R) = \frac{\beta_2}{2\sqrt{AK}} + \frac{k\beta}{2KR} - \frac{k\beta}{2R^2} \sqrt{\frac{A}{K^3}}. \quad (20)$$

Несмотря на то, что соотношение (20), представляющее собой сумму первых трех членов разложения α_m по степеням $K^{-1/2}$, становится справедливым при довольно больших значениях K , оно, разумеется, не могло быть получено в рамках приближения сильной анизотропии. Подчеркнем также, что величину α_m нельзя отождествлять с максимальным углом выхода вектора намагниченности из плоскости образца: например, из рис. 4 следует, что в случае $k = -1$, $KR^2/A = 5$ (сплошная синяя кривая на нижнем графике) значения $|\tilde{\alpha}|$ при $r \approx 2R$ превышают α_m более чем на 50% (в частности, непосредственно при $r = 2R$ имеем $|\tilde{\alpha}| \approx 1.55\alpha_m$, так как $\tilde{\alpha}(R) \approx 0.049\beta_2R/A$, $\tilde{\alpha}(2R) \approx -0.076\beta_2R/A$). Тем не менее вследствие своей простоты соотношение (20) может оказаться весьма удобным как для оценки степени искажения структур типа (6) под влиянием электрического поля, так и для экспериментальной проверки развиваемой здесь теории.

Из формулы (18) следует, что приближение слабых полей применимо только при условии $|\beta| \ll \sqrt{AK}$. Выполнение данного условия совместно с неравенством (7) обеспечивает малость каждого из трех слагаемых в правой части формулы (20), что избавляет от необходимости накладывать какие-то дополнительные ограничения. В частности, условие $|\beta| \ll A/R$, которое могло бы отвечать малости влияния НМЭВ по сравнению с обменным взаимодействием, в действительности является избыточным; кроме того, оно никак не использовалось при переходе от (4а) к уравнению (14). Таким образом, область применимости приближения слабых полей полностью содержит в себе область применимости приближения сильной анизотропии ($K \gg \beta^2/A$, $K \gg A/R^2$), что могло бы послужить аргументом в пользу отказа от использования последнего. Ясно, однако, что в рамках приближения слабых полей соотношения наподобие (9) и (13) уже не могут быть получены в наглядной форме из-за более сложного по сравнению с (8) вида зависимости α от r . Этим и объясняется важность обоих рассмотренных приближений.

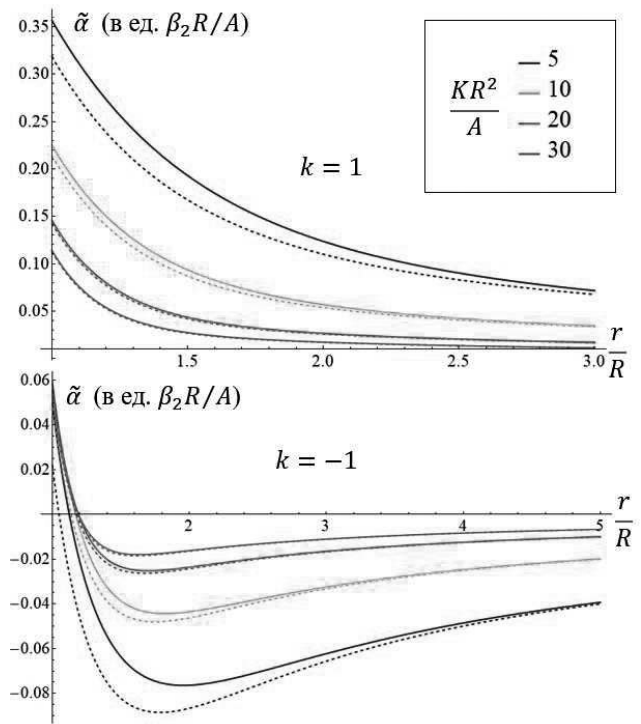


Рис. 4. Графики радиальной части $\tilde{\alpha}(r)$ зависимости $\alpha(r, \phi)$ угла отклонения вектора намагниченности от плоскости пленки при $\beta_1 = \beta_2$ (или, что то же самое, при равенстве констант НМЭВ b_1 и b_2 , которым пропорциональны величины β_1 и β_2), $k = \pm 1$ и различных значениях абсолютной величины константы анизотропии K . Значения $\tilde{\alpha}$ приведены в единицах безразмерной величины β_2R/A . Сплошные линии — значения $\tilde{\alpha}$, полученные численно; штриховые линии — результат использования приближенного выражения

5. СЛУЧАЙ $k = 1$

Из формул (9) и (12), справедливых при больших значениях K , следует, что включение внешнего электрического поля приводит к уменьшению энергии в одно и то же число раз для всех состояний системы, кроме $k = 1$. При $\beta \ll \sqrt{AK}$ единственным следствием этого эффекта становится снятие вырождения по знаку величины k при $k = \pm 1$, в остальном же энергетический спектр системы никак не перестраивается. С ростом величины β значения угла θ при $k \neq 1$, согласно формуле (13), начинают сильно меняться во всем объеме образца, из-за чего соотношение (9) уже не может использоваться для количественных оценок. Тем не менее оно позволяет на качественном уровне проследить следующую важную тенденцию: если значение величины β достаточно велико, чтобы при некотором $k \neq 1$ энергия системы была отрицательной, то энергетически выгодными формально оказыва-

ются состояния с $k \rightarrow \pm\infty$. Физически этому соответствует стабилизация нелокализованных квазипериодических структур [15]), которые в данной работе не рассматриваются. Таким образом, уединенные неоднородности с $k \neq 1$ не могут представлять собой основное состояние системы. Покажем, однако, что в отношении случая $k = 1$ данное утверждение неверно.

Заметим, что система уравнений (4а), (4б) с граничными условиями (5а), (5б) может иметь два класса решений, для которых $\theta = \phi + \phi_0$. Это, во-первых, $\alpha = 0, \theta = \phi$, что, как уже указывалось выше, в общем случае не отвечает минимуму энергии (2). Во-вторых, $\theta = \phi \pm \pi/2$ (см. рис. 2), в то время как угол α , зависящий в данном случае только от расстояния r до центра отверстия, должен определяться из уравнения (4а), которое приобретает вид

$$\alpha'' + \frac{1}{r}\alpha' + \left(\frac{1}{r^2} - \frac{K}{A}\right) \sin \alpha \cos \alpha = \mp \frac{\beta}{2Ar} \cos^2 \alpha. \quad (21)$$

Также в силу (5а) получаем следующее граничное условие при $r = R$:

$$\alpha' = \mp \frac{\beta_1 \sin^2 \alpha + \beta_2 \cos^2 \alpha}{2A}. \quad (22)$$

Поскольку на большом удалении от границ отверстия должно иметь место соотношение $|\alpha| \ll 1$, из (21) заключаем, что асимптотическое поведение функции $\alpha(r)$ при $r \rightarrow \infty$ описывается формулой (12). Очевидно, что в таком случае и усредненная плотность энергии $\langle \Phi \rangle$ вдали от отверстия также должна описываться формулой (12). Интеграл (2) при этом оказывается расходящимся, поэтому именно область больших r будет давать определяющий вклад в энергию системы W , и знак энергии будет зависеть от знака коэффициента в выражении (12) для $\langle \Phi \rangle$: если

$$|\beta| > 2\sqrt{AK}, \quad (23)$$

то $W \rightarrow -\infty$, так что состояние с $k = 1$ становится энергетически выгодным по сравнению с $k = 0$ (подчеркнем, что при $k = 0$ конечная величина W также является отрицательной в силу влияния краевых эффектов). При этом, однако, вопрос самого существования решения уравнения (21) при граничном условии (22) остается открытым.

На рис. 5 показаны графики зависимости значения угла $\alpha_m = \alpha(R)$ на границе отверстия от величины β_2 при различных значениях K для случаев $\beta_1 = \beta_2$ и $\beta_1 = -1.01\beta_2$. Эти зависимости были получены путем численной минимизации энер-

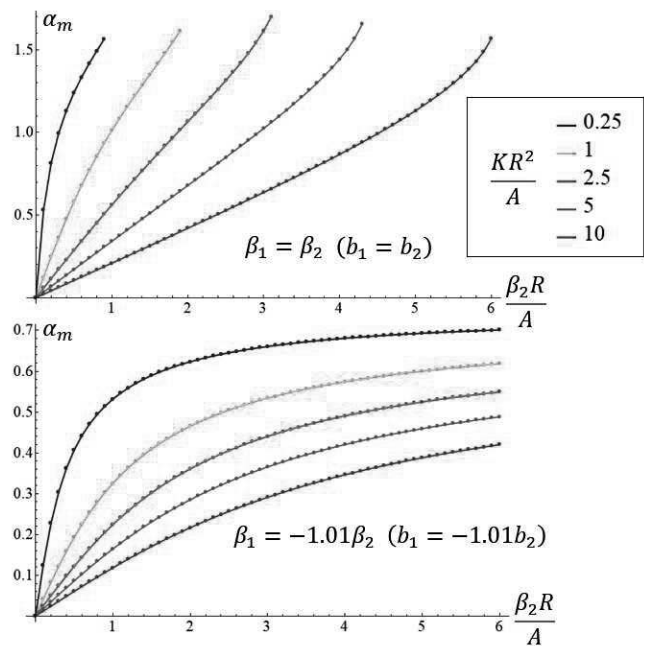


Рис. 5. Значения угла α_m отклонения вектора намагниченности от плоскости пленки на границе отверстия в зависимости от величины β_2 , пропорциональной напряженности внешнего поля, в случае $k = 1$ (типичное распределение намагниченности для данного случая представлено на рис. 2) при различных значениях абсолютной величины константы анизотропии K . Верхний и нижний графики отличаются соотношением между величинами β_1 и β_2 (или, что то же самое, между значениями констант НМЭВ b_1 и b_2 , которым пропорциональны величины β_1 и β_2)

гии (2) по отношению к функции $\alpha(r)$ с учетом равенства $\theta = \phi + \pi/2$, хотя численное решение уравнения (21) при условии (22) приводит к тем же результатам (на практике выбор в пользу алгоритма минимизации был обусловлен тем, что он позволяет получить распределение намагниченности даже в тех случаях, когда решений соответствующих уравнений Эйлера–Лагранжа формально не существует). Из приведенных графиков следует, что при условии $\beta_1 = -1.01\beta_2$ структуры изучаемого типа наблюдаются при произвольных значениях β_2 , причем при $\beta_2 \rightarrow \infty$ значения α_m выходят на некоторый предел, меньший $\pi/2$. Тем самым для любого наперед заданного значения константы K может быть выбрана настолько большая напряженность электрического поля E , что условие $|\beta| = 0.01\beta_2 > 2\sqrt{AK}$ окажется выполненным, и состояние с $k = 1$ станет для системы основным (именно для демонстрации этого обстоятельства был рассмотрен пример $\beta_1 = -1.01\beta_2$ вместо близкого к нему примера $\beta_1 = -\beta_2$, когда зависимости на рис. 5 остаются практически такими же, но при этом $\beta \equiv 0$). Напротив, в случае

$\beta_1 = \beta_2$ угол α_m приближается к $\pi/2$ при каких-то конечных значениях β_{2m} величины β_2 , зависящих от константы K (например, при $KR^2/A = 2.5$ имеем $\beta_{2m}R/A \approx 3.1$), и при $\beta_2 > \beta_{2m}$ формирующееся распределение намагниченности уже не носит характер уединенной неоднородности. Расчеты для значений KR^2/A в диапазоне от 0.25 до 10 с шагом 0.25 позволяют получить следующее эмпирическое соотношение, которое выполняется с точностью не хуже 5%:

$$\beta_{2m} = 2\sqrt{AK}. \quad (24)$$

Соответственно, состояние с $k = 1$ становится основным для системы, если выполнено условие

$$\sqrt{AK} < \beta_2 < 2\sqrt{AK},$$

т. е. напряженность поля E должна принимать значения из известного интервала.

Значительную часть описанных выше наблюдений, включая соотношение (24), затруднительно объяснить на основе анализа выражений (21) и (22) без дополнительных допущений. Тем не менее они получают наглядную интерпретацию в рамках упрощенной модели, которая рассматривается далее.

6. МОДЕЛЬ ПРЯМОЛИНЕЙНОЙ ГРАНИЦЫ

Из проведенного выше анализа ясно, что возможность существования структур, отвечающих значению $k = 1$, определяется в основном выполнимостью граничных условий типа (22). Чтобы изучить данный вопрос более детально, заметим, что в окрестности границы отверстия наличие искривления этой границы практически не должно влиять на распределение намагниченности. Поэтому вместо образца, содержащего отверстие круглой формы (см. рис. 1), можно рассмотреть приближенную модель, в которой граница отверстия является прямолинейной, т. е. магнетик заполняет полуплоскость. Математически этому соответствует предельный переход $R \rightarrow \infty$, причем конечная величина $x = r - R$ играет в данном случае роль декартовой координаты. Тем самым вместо (21) получаем следующее уравнение:

$$\alpha'' = \frac{K}{A} \sin \alpha \cos \alpha. \quad (25)$$

При этом форма граничного условия (22), которое должно выполняться при $x = 0$, остается неизменной.

Уравнение (25) имеет следующий интеграл:

$$\alpha'^2 - \frac{K}{A} \sin^2 \alpha = \text{const}. \quad (26)$$

При положительном значении константы в правой части соотношения (26) величина $|\alpha|$ будет неограниченно расти при $x \rightarrow \infty$, что отвечает формированию нелокализованной структуры с квазипериодическим распределением намагниченности. При отрицательном значении константы соотношение (26) описывает колебания угла α около положения $\pi/2$, что при наличии анизотропии типа «легкая плоскость» не может соответствовать минимуму энергии. Поэтому в случае уединенной магнитной неоднородности обсуждаемая константа должна быть равна нулю, откуда с учетом условия (22) имеем (знак «минус» перед вторым слагаемым не влияет на дальнейшие рассуждения и выбран здесь для определенности):

$$(\beta_1 - \beta_2) \sin^2 \alpha_m - 2\sqrt{AK} \sin \alpha_m + \beta_2 = 0. \quad (27)$$

Уравнение (27) в общем случае является квадратным относительно $\sin \alpha_m$, и наличие у него хотя бы одного корня, не превышающего 1 по абсолютной величине, является условием существования магнитной структуры с $k = 1$. В частности, в вырожденном случае $\beta_1 = \beta_2$ единственный корень уравнения (27) определяется соотношением

$$\sin \alpha_m = \beta_2 / (2\sqrt{AK}).$$

Следовательно, $|\beta_2| < 2\sqrt{AK}$, что полностью согласуется с эмпирической формулой (24). Кроме того, при достижении величиной β_2 своего критического значения угол α_m оказывается равен $\pm\pi/2$, что также соответствует картине, наблюдаемой на рис. 5.

Диаграмма на рис. 6 показывает сочетания значений β_1 и β_2 (напомним, что $\beta_1 = b_1 M_s^2 E$, $\beta_2 = b_2 M_s^2 E$), при которых выполняются обозначенные выше требования к уравнению (27) (этим сочетаниям соответствуют все точки, лежащие между двумя красными кривыми). Несложно видеть, что в зависимости от соотношения между константами НМЭВ b_1 и b_2 возможны три различных сценария видоизменения магнитной неоднородности с увеличением напряженности E электрического поля (что обуславливает пропорциональный рост β_1 и β_2). Во-первых, если эти константы являются величинами разных знаков ($b_1/b_2 < 0$), то даже при $E \rightarrow \infty$ магнитная неоднородность остается уединенной. При этом значение угла α на границе образца,

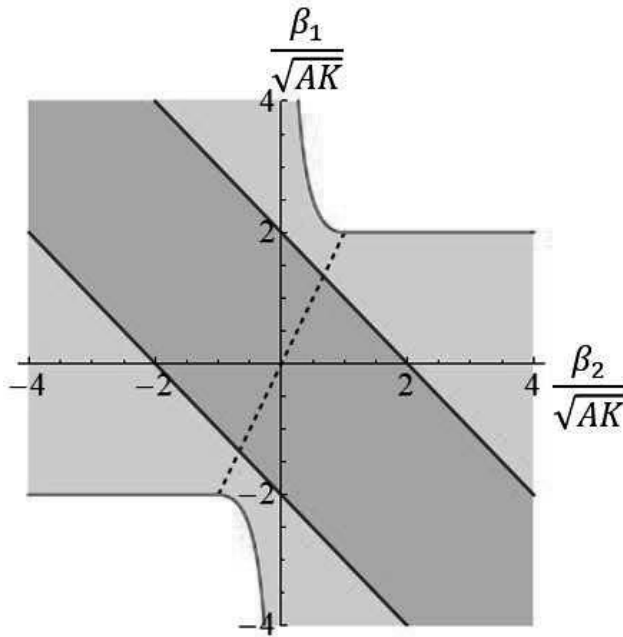


Рис. 6. Диаграмма значений параметров β_1 и β_2 (пропорциональных константам НМЭВ b_1 и b_2 соответственно, а также напряженности электрического поля E), при которых магнитные структуры, отвечающие $k = 1$, существуют (область темно-серого цвета), либо существуют и представляют собой основное состояние системы (области светло-серого цвета). Красными и синими линиями показаны границы областей. Штриховая линия соответствует равенству $\beta_1 = 2\beta_2$

согласно (27), стремится к пределу

$$|\alpha_m| = \text{arccctg} \sqrt{-b_1/b_2}.$$

В случае $b_1 \approx -b_2$ отсюда имеем $|\alpha_m| \approx \pi/4$, что неплохо согласуется с положением асимптоты соответствующих графиков на рис. 5. Во-вторых, если $0 < b_1/b_2 < 2$, то при достижении величиной $|\beta_1|$ значения $2\sqrt{AK}$ угол α_m оказывается равен $\pm\pi/2$ и дальнейший рост напряженности E с сохранением структуры неоднородности становится невозможным. В третьих, если $b_1/b_2 > 2$, то максимальное значение E , при котором еще может существовать уединенная неоднородность, определяется соотношением

$$\beta_1 = \beta_2 + AK/\beta_2.$$

При таком значении E оба корня квадратного уравнения (27) оказываются равными

$$\sin \alpha_m = \beta_2/\sqrt{AK},$$

в то время как при дальнейшем росте напряженности эти корни становятся комплексными.

Подытоживая сказанное выше, отметим, что значение угла α_m , которое достигается при максимально допустимой напряженности E , во всех случаях может быть выражено только через отношение констант НМЭВ b_1/b_2 :

$$|\alpha_m| = \begin{cases} \text{arccctg} \sqrt{-b_1/b_2}, & b_1/b_2 < 0, \\ \pi/2, & 0 < b_1/b_2 < 2, \\ \text{arccctg} \sqrt{b_1/b_2 - 2}, & b_1/b_2 > 2. \end{cases} \quad (28)$$

Также приведем явное выражение для значений E , при которых могут существовать структуры изучаемого типа:

$$|E| < E_{max} = \begin{cases} \infty, & b_1/b_2 < 0, \\ \frac{2\sqrt{AK}}{M_s^2|b_1|}, & 0 < b_1/b_2 < 2, \\ \frac{\sqrt{AK}}{M_s^2\sqrt{b_2(b_1 - b_2)}}, & b_1/b_2 > 2. \end{cases} \quad (29)$$

Аналогичное условие (23), при выполнении которого состояние с $k = 1$ становится энергетически выгодным, можно записать в следующем виде:

$$|E| < E_{min} = \frac{2\sqrt{AK}}{M_s^2|b_1 + b_2|}. \quad (30)$$

Таким образом, если материальные параметры магнетика известны, то формулы (29) и (30) позволяют рассчитать диапазон значений напряженности E , при которых основному состоянию системы отвечает распределение намагниченности наподобие того, что показано на рис. 2. Этим значениям соответствуют точки, принадлежащие светло-серым областям на рис. 6 (синими линиями на диаграмме показаны границы $|E| = E_{min}$, а красными $|E| = E_{max}$). Отсюда видно, что обсуждаемые диапазоны существуют при произвольных значениях отношения $b_1/b_2 \neq -1$, однако при $b_1/b_2 \approx 2$ становятся довольно узкими.

Следует отдельно остановиться на том обстоятельстве, что радиус отверстия R не входит явно ни в одну из формул (29) и (30). Отсюда можно было бы неверно заключить, что полученные результаты остаются полностью справедливыми также и при $R = 0$, т. е. в отсутствие отверстия. Ясно, однако, что при $R \ll \sqrt{A/K}$ предельный переход $R \rightarrow \infty$, лежащий в основе вывода соотношения (29), утрачивает смысл. Тем не менее формирование структур, отвечающих $k = 1$, принципиально возможно и в пленках, не содержащих перфораций. Действительно, в случае образца такой геометрии уравнение (21)

также может иметь нетривиальное решение, которое вместо (22) будет удовлетворять условию вида $\alpha(r=0) = \pm\pi/2$. Асимптотическое поведение этого решения при $r \rightarrow \infty$, как и при наличии отверстия, будет определяться соотношениями (12), а значит, сохраняет свою силу и условие (30), при выполнении которого неоднородность становится энергетически выгодной. Из этого, по сути, следует, что появление вихреподобных неоднородностей не связано напрямую с наличием перфораций: при включении поля достаточной силы схожие по строению структуры могут в равной степени возникать как в области отверстия, так и вдали от него (сходство структур этих двух типов усугубляется еще и тем, что, согласно формуле (28), значение угла α на границе отверстия также в некоторых случаях может приближаться к $\pm\pi/2$). Заметим, однако, что в отсутствие отверстия (или вдали от него) зарождение неоднородных структур всегда связано со спонтанным нарушением трансляционной симметрии системы, поэтому локализация вихреподобной структуры в области отверстия в целом гораздо вероятнее. В этом смысле перфорации следует рассматривать как своеобразные центры кристаллизации, искусственно привнесенные в систему; разумно ожидать, что при их наличии флуктуационные механизмы образования неоднородных структур вне отверстий должны быть либо заметно ослаблены, либо подавлены полностью. Другим существенным недостатком вихреподобных неоднородностей, формирующихся вне отверстий, является то, что при медленном отключении внешнего поля они не переходят в состояние типа (6) с сохранением величины $k = 1$, а попросту разрушаются. Этим и обусловлен невысокий интерес к структурам такого типа в рамках настоящего исследования.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Несмотря на чисто теоретический характер данной работы, полученные в ней результаты позволяют в перспективе решить целый ряд важных практических задач, связанных с управлением неоднородными магнитными структурами. Во-первых, то обстоятельство, что под воздействием однородного электрического поля вектор намагниченности начинает отклоняться от плоскости пленки, может быть использовано для идентификации текущего состояния системы. Действительно, из проведенных расчетов следует, что пространственное распределение нормальной компоненты вектора намагниченности, возникающее при включении поля, зависит не толь-

ко от величины k , определяющей топологию вихреподобной структуры, но также и от ориентации структуры на плоскости. При этом о значении k можно судить уже по максимальному углу α_m отклонения вектора намагниченности на границе отверстия: зависимость между этими величинами является практически линейной. Поскольку влияние НМЭВ не меняет симметрию магнитных структур, по окончании импульса электрического поля они будут релаксировать в состояние, полностью совпадающее с исходным, что обеспечивает высокую надежность излагаемого подхода к идентификации состояния системы.

Во-вторых, приведенные оценки степени искажения магнитных структур электрическим полем позволяют судить о характерной величине напряженности поля, при которой флексомагнитоэлектрический эффект становится заметным. Благодаря этому, в частности, оказывается возможно подобрать такие материалы, в которых управление вихреподобными структурами посредством электрического поля не связано с чрезмерными энергозатратами, однако чувствительность к паразитным внешним полям остается невысокой.

В-третьих, изменение топологии основного состояния магнитной структуры в полях определенной величины открывает возможности для реализации следующего сценария. Пусть изначально распределение намагниченности близко к однородному, чему соответствует значение $k = 0$. В результате быстрого включения поля система перейдет в новое основное состояние с $k = 1$. Если после этого плавно снизить напряженность поля до нуля, то система может остаться в состоянии с $k = 1$, которое будет уже метастабильным, однако долгоживущим в силу причин топологического характера [21]. Такая возможность переключения состояния системы посредством импульсного воздействия говорит о перспективах использования перфорированных пленок в качестве основы для создания перезаписываемой памяти. Отметим, что на практике для решения этой задачи следует использовать пары близкорасположенных отверстий [21]: только в этом случае формирующиеся магнитные неоднородности оказываются хорошо локализованными в пространстве. При этом нет нужды напрямую воздействовать сразу на оба отверстия в паре: как показывает анализ аналогичного сценария для случая управления магнитным полем [25], в результате перевода одной из структур из состояния с $k = 0$ в состояние с $k = 1$ связанная с ней вторая структура спонтанно переходит в состояние с $k = -1$ под влиянием обменного

взаимодействия. Это становится особенно важно в связи с тем, что, в отличие от электрического поля заряженной нити, позволяющего стабилизировать структуры с произвольным значением k [20], однородное электрическое поле может стабилизировать только состояние с $k = 1$, но не с $k = -1$. Такое отсутствие гибкости в управлении, однако, должно сполна компенсироваться сравнительной простотой создания однородных полей.

Несмотря на привлекательность описанных выше подходов, необходимо признать, что их реализация на практике может оказаться довольно затруднительной. Локализация вихреподобных структур изученного типа на наноразмерных перфорациях возможна лишь в материалах с исключительно сильной легкоплоскостной анизотропией (например, NdCo_5 [23]), в которых флексомагнитоэлектрический эффект, как правило, не наблюдается. Выходом из данного положения может стать либо искусственное создание нужной анизотропии, например в пленках ферритов-гранатов, либо наноструктурирование магнитоодноосных пленок с целью усиления НМЭВ. Так или иначе, данный вызов может оказаться довольно серьезным для современной науки о материалах.

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания для научных исследований лабораториями (приказ MN-8/1356 от 20.09.2021)

ЛИТЕРАТУРА

1. A. Bogdanov and A. Hubert, *J. Magn. Magn. Mater.* **138**, 255 (1994).
2. T. Shinjo, T. Okuno, R. Hassdorf et al., *Science* **289**, 930 (2000).
3. K. Y. Guslienko, *J. Nanosci. Nanotechnol.* **8**, 2745 (2008).
4. S. Mühlbauer, B. Binz, F. Jonietz et al., *Science* **323**, 915 (2009).
5. A. N. Bogdanov and C. Panagopoulos, *Nat. Rev. Phys.* **2**, 492 (2020).
6. K. Everschor-Sitte, J. Masell, R. M. Reeve et al., *J. Appl. Phys.* **124**(24), 240901 (2018).
7. А. С. Самардак, А. Г. Колесников, А. В. Давыденко и др., *ФММ* **121**, 260 (2022).
8. K. Raab, M. A. Brems, G. Beneke et al., *Nat. Commun.* **13**, 6982 (2022).
9. D. Navas, R. V. Verba, A. Hierro-Rodriguez et al., *APL Mater.* **7**, 0811114 (2019).
10. L. Liu, C.-T. Chen and J. Z. Sun, *Nat. Phys.* **10**, 561 (2014).
11. F. Jonietz, S. Mühlbauer, C. Pfleiderer et al., *Science* **330**, 1648 (2010).
12. A. Sparavigna, A. Strigazzi and A. Zvezdin, *Phys. Rev. B* **50**, 2953 (1994).
13. I. Dzyaloshinskii, *Europhys. Lett.* **83**, 67001 (2008).
14. A. S. Logginov, G. A. Meshkov, A. V. Nikolaev et al., *Appl. Phys. Lett.* **93**, 182510 (2008).
15. А. П. Пятаков, А. К. Звездин, *УФН* **182**, 593 (2012).
16. Р. М. Вахитов, З. В. Гареева, Р. В. Солонецкий и др., *ФТТ* **61**, 1120 (2019).
17. А. Ф. Кабыченков, Ф. В. Лисовский, Е. Г. Мансветова, *Письма в ЖЭТФ* **97**, 304 (2013).
18. Г. В. Арзамасцева, А. М. Балбашов, Ф. В. Лисовский и др., *ЖЭТФ* **147**, 793 (2015).
19. Д. П. Куликова, А. П. Пятаков, Е. П. Николаева и др., *Письма в ЖЭТФ* **104**, 196 (2016).
20. E. B. Magadeev and R. M. Vakhitov, *J. Magn. Magn. Mater.* **587**, 171230 (2023).
21. Е. Б. Магадеев, Р. М. Вахитов, *Письма в ЖЭТФ* **115**, 123 (2022).
22. Е. Б. Магадеев, Р. М. Вахитов, Р. Р. Канбеков, *ЖЭТФ* **162**, 417 (2022).
23. Е. Б. Магадеев, Р. М. Вахитов, Р. Р. Канбеков, *ЖЭТФ* **163**, 78 (2023).
24. К. Л. Метлов, *Письма в ЖЭТФ* **118**, 95 (2023).
25. E. Magadeev, R. Vakhitov, I. Sharafullin, *Entropy* **24**, 1104 (2022).
26. P. I. Karpov and S. I. Mukhin, *Phys. Rev. B* **95**, 195136 (2017).
27. A. Hubert and R. Shafer, *Magnetic Domains*, Springer-Verlag, Berlin (2007).
28. E. B. Magadeev, R. M. Vakhitov, and R. R. Kanbekov, *Europhys. Lett.* **142**, 26001 (2023).

УПРАВЛЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРОЙ СПИН-ПЕРЕОРИЕНТАЦИОННОГО ПЕРЕХОДА В МОНОКРИСТАЛЛАХ ОРТОФЕРРИТОВ $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$

К. А. Шайхутдинов^{a*}, С. А. Скоробогатов^a, Ю. В. Князев^a, Т. Н. Камкова^{a,b},
А. Д. Васильев^{a,b}, С. В. Семенов^{a,b}, М. С. Павловский^{a,b}, А. А. Красиков^a

^a Институт физики им. Л. В. Киренского,
ФИЦ КНЦ Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия

^b Сибирский федеральный университет
660041, Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 8 ноября 2023 г.,
после переработки 28 декабря 2023 г.
Принята к публикации 28 декабря 2023 г.

Методом оптической зонной плавки выращены монокристаллы $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ ($0 < x < 1$). Обнаружено, что в области концентраций $x = 0.7\text{--}0.8$ наблюдается структурный переход от ромбической к гексагональной модификации кристаллов, что было подтверждено рентгеноструктурными исследованиями. Для серии ромбических кристаллов проведены исследования эффекта Мессбауэра при комнатной температуре и магнитные измерения в температурном интервале 4.2–1000 К. Обнаружено, что при увеличении концентрации марганца температура спин-переориентационного перехода значительно возрастает от ~ 60 К для HoFeO_3 до комнатной температуры для состава $\text{HoFe}_{0.6}\text{Mn}_{0.4}\text{O}_3$. Из магнитных измерений установлено, что при замещении железа на марганец изменяется тип магнитного ориентационного перехода от перехода второго рода ($A_x F_y G_z \rightarrow C_x G_y F_z$) к переходу первого рода ($A_x F_y G_z \rightarrow G_x C_y A_z$) с наличием слабого ферромагнитного момента только в направлении **b** (для пространственной группы $Pnma$). Такое увеличение температуры спин-переориентационного перехода может быть объяснено изменениями величины косвенного обмена в подсистеме железа из-за влияния марганца, что было обнаружено при исследовании эффекта Мессбауэра в $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ для образцов с $x < 0.4$.

DOI: 10.31857/S0044451024050080

1. ВВЕДЕНИЕ

Оксидные материалы, содержащие ионы переходных и редкоземельных элементов, проявляют множество интересных эффектов, связанных со сложным взаимодействием двух магнитных подсистем. В отдельный класс таких материалов можно выделить редкоземельные ортоферриты с общей формулой RFeO_3 [1–5], исследование которых началось более полувека назад. Кристаллическая структура RFeO_3 описывается пространственной группой $Pnma$ (№ 62). Несмотря на то, что их магнитные свойства подробно исследованы, в последние годы интерес к данным соединениям вновь вырос в связи с открытием в них таких интересных явлений, как

мультиферроизм ниже температуры упорядочения редкоземельной подсистемы [5, 6], индуцированное лазером сверхбыстрое перемагничивание доменных стенок [7–9], формирование солитонной решетки в соединении TbFeO_3 [10], существование квазиодномерных спиновых цепочек Yb^{3+} в YbFeO_3 [5, 11]

Редкоземельные ортоферриты представляют собой интересное семейство с точки зрения магнитных явлений. Их уникальные магнитные свойства возникают в результате сложных взаимодействий между моментами $3d$ - и $4f$ -электронов. Известно [1], что соединения RFeO_3 имеют необычайно высокие температуры Нееля ($T_N \approx 600\text{--}700$ К), ниже которых моменты Fe упорядочены антиферромагнитно со слабым скосом подрешеток, что приводит к слабому ферромагнетизму. При понижении температуры роль взаимодействия Fe–R повышается, это приводит к тому, что при более низких температурах про-

* E-mail: smp@iph.krasn.ru

исходят ориентационные спиновые переходы, температура T_{SR} которых сильно зависит от редкоземельного иона, например, $T_{SR} \approx 50\text{--}60\text{ К}$ для HoFeO_3 [12, 13], $T_{SR} \approx 80\text{--}90\text{ К}$ для TmFeO_3 [12, 14], а использование Tb в качестве редкоземельного иона приводит к резкому падению температуры, $T_{SR} \approx 3\text{--}10\text{ К}$ [10, 15]. Отдельно можно отметить SmFeO_3 [16], ориентационный переход в котором наблюдается при $T_{SR} \approx 450\text{--}480\text{ К}$. Подсистема ионов редкоземельных элементов с относительно слабым взаимодействием R–R при высоких температурах является парамагнитной или слабо поляризованной молекулярным полем упорядоченных ионов Fe. Редкоземельная магнитная подрешетка становится упорядоченной ниже $T_{NR} < 10\text{ К}$ (температура упорядочения редкоземельной подсистемы). Наблюдаемые магнитные свойства системы возникают из-за множественности различных обменных взаимодействий. Помимо обменных взаимодействий гейзенберговского типа Fe–Fe, Fe–R, R–R, важную роль в определении магнитных свойств играет взаимодействие Дзялошинского–Мория [17, 18], которое обуславливает появление слабого ферромагнитного момента.

Одним из способов управления температурой спин-переориентационного перехода является изовалентное замещение в подсистеме железа в $\text{RFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ ($\text{M} = \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Co}, \text{Ni}$). При этом появляется возможность «плавного» изменения магнитных свойств в таких системах и выбора нужной температуры T_{SR} , например, для процессов сверхбыстрого перемагничивания доменной стенки [7–9]. Так, в работе [19] в монокристалле $\text{TbFe}_{0.75}\text{Mn}_{0.25}\text{O}_3$ наблюдался эффект «возвратного» спин-переориентационного перехода (T_{SR}) при температуре 250 К, тогда как для чистого монокристалла TbFeO_3 спин-переориентационный переход наблюдается при температурах 3 и 8 К. В работе [20] проведен успешный рост монокристалла $\text{SmFe}_{0.75}\text{Mn}_{0.25}\text{O}_3$ и показано, что при замещении части железа на марганец происходит существенное уменьшение температуры T_{SR} . В работе [21] авторам удалось вырастить серию монокристаллов $\text{PrFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ ($0 < x < 0.3$) и показать, что при концентрации марганца 30% спин-переориентационный переход сдвигается в область комнатных температур. Авторам работы [22] удалось успешно вырастить ряд монокристаллов $\text{GdFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ ($0 < x < 0.3$). В недавней работе [23] авторами представлены результаты успешного роста монокристалла $\text{Nd}_{0.8}\text{Pr}_{0.2}\text{FeO}_3$, при этом наблюдалось уменьшение величины T_{SR} .

Если рассматривать работы, проведенные на поликристаллических образцах, то их количество существенно больше. Однако в плане потенциального практического применения таких ортоферритов в микроэлектронике желательно работать с монокристаллическими образцами. Можно выделить работы [24–26], в которых исследовались ортоферриты диспрозия, тербия и иттрия с замещением части железа на марганец и также наблюдалось изменение T_{SR} . В литературе также встречаются работы [27–29], в которых авторам удавалось осуществить замещение на другие переходные элементы (хром, никель, кобальт) в подсистеме железа и также наблюдать изменение T_{SR} .

Что касается соединения $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$, то в работах [30, 31] авторами были получены поликристаллические образцы $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ ($0 < x < 0.5$) и исследованы их магнитные и структурные особенности. Действительно, при концентрации $x = 0.4$ температура спин-переориентационного перехода в таком соединении достигла комнатных значений. Однако на фоне парамагнетизма гольмия сам спин-переориентационный переход превращается лишь в небольшую аномалию на кривой намагниченности, т. е. для подробного изучения эволюции магнитных свойств необходимо проводить измерения на монокристаллических образцах.

В связи с этим данная работа посвящена выращиванию монокристаллических образцов $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ с концентрацией марганца до максимальной, при которой данный твердый раствор остается стабильным в ромбической фазе, и исследованию их магнитных свойств. Также для потенциального практического использования ортоферритов в спинтронике и в качестве элементов магнитной памяти, работающих при комнатной температуре, необходимо использовать именно монокристаллические образцы.

Таким образом, можно сказать, что изовалентному замещению в ортоферритах посвящено достаточно много работ, в которых основное внимание уделялось изменению температур ориентационных переходов в них. В случае монокристаллических образцов использовались небольшие (обычно $x < 0.3$) замещения в подсистеме железа. Целью данной работы являются рост и исследование магнитных свойств монокристаллов $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ до максимально возможной концентрации марганца, при которой твердый раствор остается стабильным в ромбической фазе. Еще одной целью работы являлась попытка вырастить монокристаллы $\text{RFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ с $x > 0.05$, поскольку по литератур-

ным источникам известно, что для случая $x < 0.05$ такие образцы были получены [32].

Следует также упомянуть, что мессбауэровская спектроскопия может давать важную информацию о спин-переориентационных переходах [33–36], поскольку позволяет напрямую наблюдать угол между направлением сверхтонкого магнитного поля на ядрах и направлением градиента электрического поля, вызванного кристаллическим полем [37].

2. ЭКСПЕРИМЕНТ

На первом этапе для получения образцов $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ ($x = 0, 0.05, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8$) порошки исходных ингредиентов Ho_2O_3 , Fe_2O_3 , MnO_2 (99.9%, Alfa Aesar) смешивались в нужной пропорции и отжигались при температуре 925°C в течение 18 ч. Отожженные порошки засыпались в резиновую форму и прессовались в гидростатическом прессе при давлении около 100 МПа. Полученные цилиндрические образцы далее отжигались в вертикальной печи при температуре 1400°C в течение 16 ч. После этого синтезированные поликристаллические образцы $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ помещались в печь оптической зонной плавки FZ-T-4000-H-VIII-VPO-PC (Crystal Systems Corp.), где и происходил рост монокристаллов. Рост проходил на воздухе при нормальном давлении и относительной скорости вращения стержней 30 оборотов/мин. Скорости роста варьировались от 3 до 1 мм/ч в зависимости от соотношения железа и марганца в $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$. Следует также отметить, что нами была предпринята попытка роста монокристаллов $\text{HoFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$, $\text{HoFe}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$, $\text{HoFe}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_3$ с $x = 0.05$, однако даже замещение железа на 5% хрома или никеля приводило к неконгруэнтному плавлению расплава и невозможности получения качественных монокристаллов. Варьирование давления (до 10 атм) и газовой среды (O_2 , Ar-O_2 , Ar-H_2) в этом случае также не приводило к улучшению условий роста. Монокристалл $\text{HoFe}_{0.95}\text{Co}_{0.05}\text{O}_3$ был успешно выращен, однако проведенные измерения температурных зависимостей намагниченности $M(T)$ оказались такими же, как и для кристалла HoFeO_3 , что говорит о том, что замещения железа на кобальт не произошло в процессе роста.

Для решения кристаллической структуры и определения фазового состава в $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ использовался рентгеновский монокристалльный дифрактометр Bruker SMART APEX II. Измерения проводились при комнатной температуре. Для ориентации полученных образцов вдоль кристал-

лографических осей использовался дифрактометр Лауэ (Photonic Science). Мессбауэровские спектры исследуемых образцов получены на спектрометре MC-1104Ем в геометрии пропускания с радиоактивным источником $^{57}\text{Co}(\text{Rh})$ при температуре 300 К. Для измерения температурных и полевых зависимостей намагниченности выращенных монокристаллов в температурном диапазоне 4.2–350 К использовалась установка PPMS-6000 (Quantum Design). Высокотемпературные измерения намагниченности (350–1000 К) проводились на вибрационном магнитометре LakeShore Cryotronics VSM-8604. После циклирования по температуре до 1000 К отдельно проверялась повторяемость характерных температур (значения температур Нееля и спин-переориентационного перехода), а также величины намагниченности. Оказалось, что все измерения полностью повторяемы.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЯ

3.1. Структурная характеристика

Для проверки качества всех выращенных монокристаллов $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ и их ориентации вдоль трех кристаллографических осей использовался метод Лауэ. В качестве примера на рис. 1 приведе-

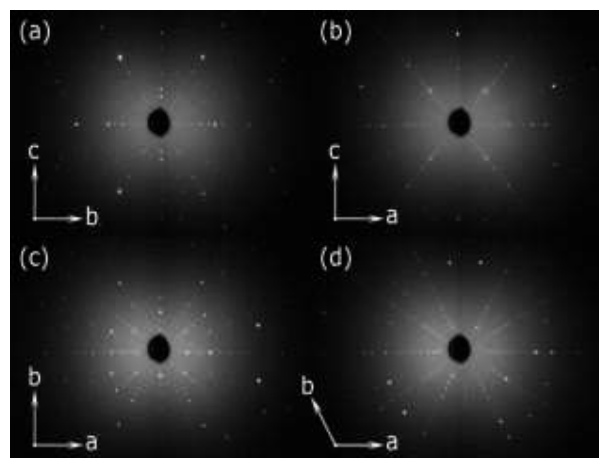


Рис. 1. Лауэграммы образца $\text{HoFe}_{0.7}\text{Mn}_{0.3}\text{O}_3$ вдоль различных кристаллографических направлений (a , b , c) и образца $\text{HoFe}_{0.2}\text{Mn}_{0.8}\text{O}_3$ вдоль оси шестого порядка кристалла (d)

ны лауэграммы образца с $x = 0.3$ вдоль различных кристаллографических направлений (рис. 1*a, b, c*) и образца с $x = 0.8$ (рис. 1*d*). Наличие резких и симметричных по форме пиков и отсутствие дублирования говорит о высоком качестве полученных кристаллов. Кроме этого, для образца с $x = 0.3$

Таблица 1. Параметры и объем элементарной ячейки в $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$

x	$a, \text{\AA}$	$b, \text{\AA}$	$c, \text{\AA}$	$V, \text{\AA}^3$
0	5.6029(5)	7.6151(7)	5.2921(5)	225.80(5)
0.05	5.6133(3)	7.6102(5)	5.2885(3)	225.92(2)
0.1	5.6201(5)	7.5990(4)	5.2840(3)	225.66(2)
0.2	5.6425(3)	7.5801(4)	5.2864(3)	226.10(2)
0.3	5.6608(3)	7.5551(3)	5.2826(2)	225.93(2)
0.4	5.6911(4)	7.5411(5)	5.2840(4)	226.77(3)
0.5	5.7065(3)	7.5080(4)	5.2779(3)	226.73(3)
0.6	5.7085(3)	7.5029(3)	5.2768(2)	226.01(2)
0.7	5.7385(3)	7.4688(4)	5.2728(3)	225.99(3)

рефлексы соответствуют пространственной группе $Pnma$ (№62), тогда как для образца с $x = 0.8$ лауэграмма соответствует пространственной группе $P63cm$ (№185). Таким образом, при замещении железа на марганец в $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ при концентрациях $0.7 < x < 0.8$ наблюдается граница раздела фаз между орторомбической и гексагональной модификациями в твердом растворе $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$.

Отметим, что монокристалл с $x = 1$ («чистый» HoMnO_3) может быть получен в орторомбической модификации раствор-расплавным методом [38], который позволяет существенно понизить температуру расплава, однако при использовании метода оптической зонной плавки удается получить только гексагональную модификацию HoMnO_3 [39]. На основе полученных данных о фазовой границе в $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ далее в работе приводятся результаты исследования монокристаллов $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ в орторомбической модификации ($x < 0.7$), выращенных при одинаковых условиях методом зонной плавки.

Из результатов монокристалльного рентгеноструктурного анализа также было установлено, что все монокристаллы $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ ($x < 0.7$) являются орторомбическими с пространственной группой $Pnma$; данная установка является стандартной. В некоторых работах других авторов использовалась установка с пространственной группой симметрии $Pbnm$. Переход от одной установки к другой можно описать следующим образом: $a, b, c(Pnma) \rightarrow b, c, a(Pbnm)$. Параметры ячейки и длины связей представлены в табл. 1 и на рис. 2.

Из табл. 1 и рис. 2 видно, что при изовалентном замещении железа на марганец в $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ ($x < 0.7$) наблюдается линейное изменение параметров ячейки во всем диапазоне концентраций. При этом параметр a линейно увеличивается, b умень-

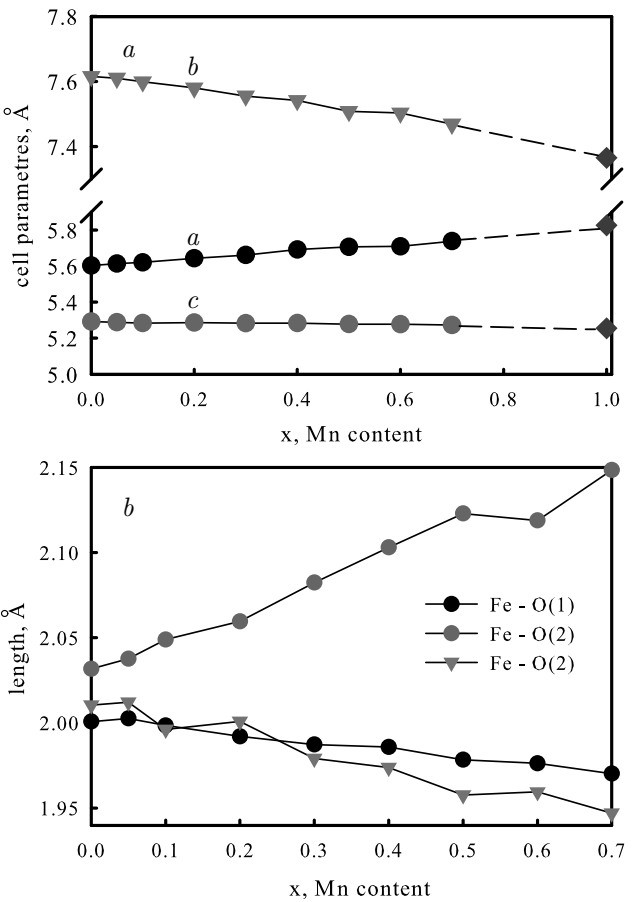


Рис. 2. (В цвете онлайн) *a* — Изменение параметров ячейки a, b, c в $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ в зависимости от концентрации марганца. Синие ромбы — значения параметров ячейки для кристалла HoMnO_3 из работы [38]. *b* — Концентрационная зависимость длин связей Fe–O(1) и Fe–O(2) в железо-кислородном октаэдре в зависимости от содержания марганца

шается, а параметр c уменьшается незначительно; объем элементарной ячейки при этом остается практически неизменным. На рис. 2 представлена концентрационная зависимость длин связей Fe–O(1) и Fe–O(2) в железо-кислородном октаэдре. Видно, что при увеличении x октаэдр сжимается вдоль направления b , а наибольшие изменения наблюдаются в плоскости октаэдра, близкой к плоскости ac , где наблюдается значительное удлинение связи Fe–O(2). Используя результаты монокристаллической рентгеновской дифракции, можно определить направление главной компоненты тензора градиента электрического поля (ГЭП) V_{zz} , которое обычно определяет направление главной оси в октаэдре. Значение V_{zz} можно найти из данных рентгеновской дифракции по известным длинам связей и углам в октаэдрическом окружении железа в приближении бли-

жайших соседей [37], используя выражение

$$V_{zz} = \sum 2e \frac{3 \cos^2 \theta - 1}{r^3},$$

(1)

где θ — угол между этой осью и направлением на соседний ион кислорода, e — заряд электрона, r — расстояние металл–кислород. При расчете проверяются все возможные направления оси ГЭП в локальном окружении катиона, после чего главная компонента тензора ГЭП выбирается из условия $|V_{zz}| \geq |V_{yy}| \geq |V_{xx}|$.

Таблица 2. Расстояния металл–кислород (в ангстремах) в зависимости от концентрации Mn

<i>x</i>	M–O1(4c)	M–O2(8d)	M–O2(8d)
0.0	2.001	2.011	2.032
0.05	2.003	2.012	2.038
0.1	1.998	1.996	2.049
0.2	1.992	2.001	2.060
0.3	1.987	1.979	2.082
0.4	1.986	1.974	2.103

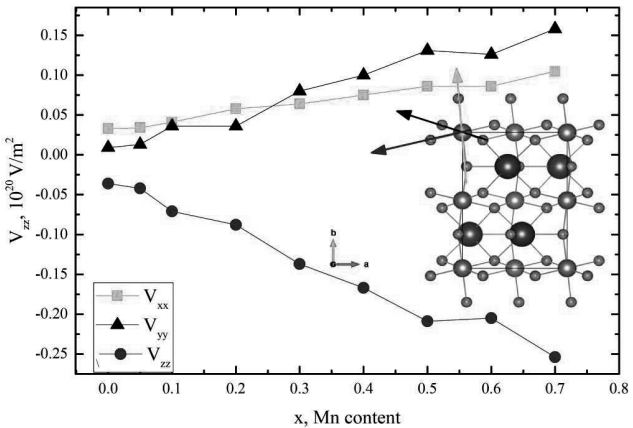


Рис. 3. (В цвете онлайн) Значение компонент тензора ГЭП в зависимости от концентрации Mn в HoFe_{1-x}Mn_xO₃. На вставке показаны направления всех компонент вектора ГЭП относительно кристаллографических осей

Результаты расчета по всем возможным направлениям для всех образцов приведены в табл. 2 и на рис. 3. Таким образом, мы определяем направление главной компоненты тензора ГЭП относительно кристаллографических осей в кристалле, которое показано на вставке синим цветом. Длина химической связи в этом направлении превышает длины химических связей в двух других направлениях. Таким образом, кислородный октаэдр имеет вытянутую форму.

3.2. Эффект Мессбауэра

Образцы для исследования эффекта Мессбауэра готовились путем перетирания монокристаллов HoFe_{1-x}Mn_xO₃ ($0 < x < 0.4$) до состояния порошка. Полученный порошок с навеской 5–10 мг/см² по содержанию железа прессовался в алюминиевой фольге диаметром 20 мм. Обработка была выполнена в два этапа. На первом этапе определялись возможные неэквивалентные позиции железа в образцах с помощью расчета распределений вероятностей сверхтонких полей. В соответствии с полученными результатами формировался предварительный модельный спектр. На следующем этапе модельный спектр подгонялся к экспериментальному при варьировании всего набора сверхтонких параметров методом наименьших квадратов в линейном приближении.

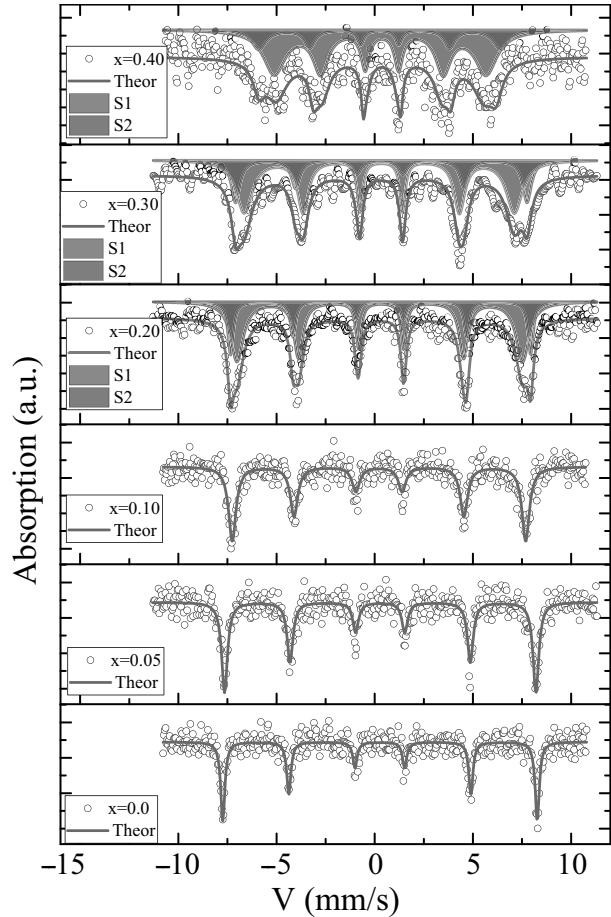


Рис. 4. (В цвете онлайн) Мессбауэровские спектры образцов HoFe_{1-x}Mn_xO₃ ($x = 0, 0.05, 0.10, 0.20, 0.30, 0.40$). Результат обработки показан сплошной линией. Закрашенные области показывают парциальные составляющие в спектрах

Полученные спектры приведены на рис. 4. Они представляют собой полностью разрешенные зеема-

Таблица 3. Мессбауэровские параметры при 300 К (δ — химический изомерный сдвиг относительно α -Fe, H_{hf} — сверхтонкое поле на ядрах железа, Δ — квадрупольное расщепление, W — ширина мессбауэровской линии на полувысоте, dH — уширение мессбауэровской линии из-за неоднородности магнитного окружения, A — относительная заселенность позиции)

	δ , ± 0.005 мм/с	H_{hf} , ± 5 кЭ	Δ , ± 0.02 мм/с	W , ± 0.03 мм/с	dH , ± 0.03 мм/с	A , ± 0.03 усл. ед.
HoFeO ₃						
S1	0.387	498	0.02	0.26	0	1.0
$x = 0.05$						
S1	0.374	492	0.00	0.20	0.20	1.0
$x = 0.10$						
S1	0.382	465	−0.00	0.46	0	1.0
$x = 0.20$						
S1	0.402	452	−0.14	0.25	0.54	0.73
S2	0.388	475	0.08	0.33	0	0.27
$x = 0.30$						
S1	0.368	409	−0.19	0.21	0.73	0.70
S2	0.388	441	0.12	0.51	0	0.30
$x = 0.40$						
S1	0.427	335	−0.20	0.37	0.98	0.75
S2	0.361	383	0.08	0.31	0.58	0.25

новские секстеты $S1$ и $S2$. Результаты математической обработки спектров приведены в табл. 3. Величина химического сдвига δ для всех образцов относительно α -Fe указывает на зарядовое состояние $3+$ высокоспиновых катионов железа в октаэдрическом окружении, что соответствует кристаллической структуре ортоферритов и предыдущим мессбауэровским результатам [40, 41]. С ростом замещения катионами Mn^{3+} до $x = 0.20$ наблюдается появление дополнительной позиции железа, которой соответствует секстет с большим сверхтонким полем. Доля этого секстета увеличивается скачком и в интервале $x = 0.20$ – 0.40 практически не изменяется, что может указывать на то, что катионы марганца занимают определенные позиции в решетке при указанных концентрациях. Косвенно это подтверждается наличием двух характерных участков на концентрационной зависимости среднего значения сверхтонкого поля на ядрах железа, которая сохраняет монотонный характер (рис. 5).

Обратим внимание на зависимость квадрупольного сдвига Δ основного секстета от концентрации марганца в кристаллической структуре монокристалла $HoFe_{1-x}Mn_xO_3$, которая показана на рис. 6.

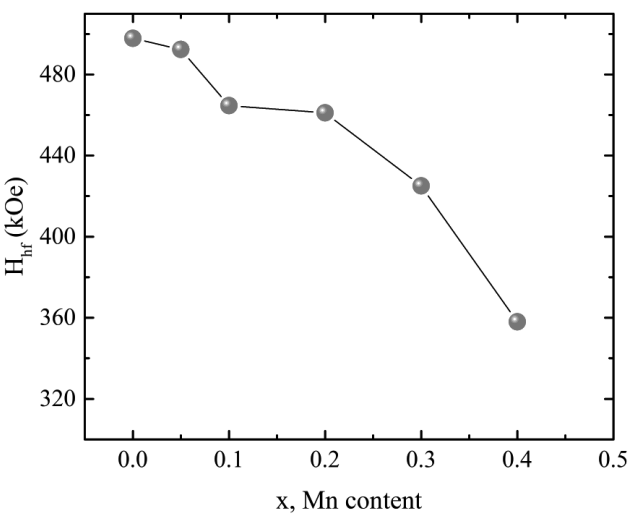


Рис. 5. Концентрационная зависимость среднего значения сверхтонкого поля на ядрах железа в $HoFe_{1-x}Mn_xO_3$

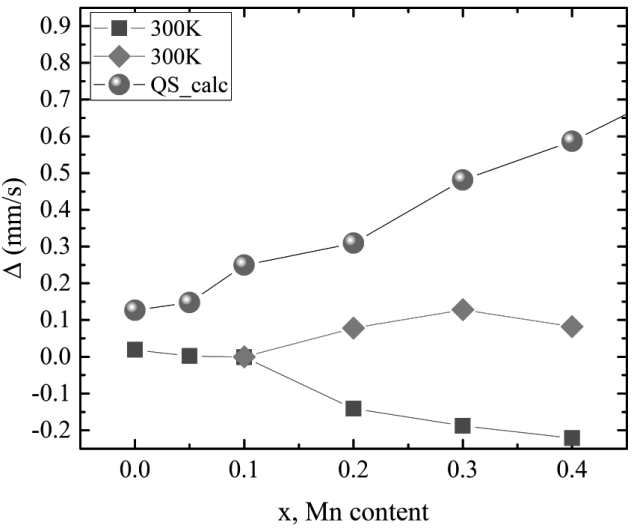


Рис. 6. (В цвете онлайн) Концентрационная зависимость квадрупольного сдвига Δ в $HoFe_{1-x}Mn_xO_3$ ($0 < x < 0.4$). Круглыми символами показаны расчетные значения квадрупольного сдвига по данным рентгеновской дифракции

Эта зависимость демонстрирует монотонное уменьшение квадрупольного сдвига с ростом содержания Mn в образцах. При этом мы отмечаем изменение знака Δ при содержании Mn $x = 0.20$ для секстета с большей площадью. Это может быть связано с действием одноионной анизотропии катионов марганца, которая вносит серьезный вклад в формирование тензора ГЭП. Что касается поведения квадрупольного сдвига второго секстета, то его знак сохраняется во всем диапазоне концентраций, а значение меняется незначительно при росте степени замещения.

Квадрупольный сдвиг мессбауэровского спектра имеет два источника: 1) вклад от локальных иска-

жений кристаллической решетки и 2) вклад от взаимного направления векторов $\mathbf{V}_{zz}$ и $\mathbf{H}_{hf}$. Первый определяет решеточный вклад в величину квадрупольного расщепления в парамагнитном состоянии, которое можно с учетом эффекта антиэкранирования Штернхеймера [42, 43] определить в виде

$$QS = (1 - \gamma_\infty) \frac{1}{2} eQV_{zz} \left(1 + \frac{\eta^2}{3} \right)^{1/2}. \quad (2)$$

В этом выражении $\gamma_\infty = -9.44$ — фактор антиэкранирования Штернхеймера для сферически-симметричного катиона Fe^{3+} [44], Q — ядерный квадрупольный момент ^{57}Fe , $\eta = (V_{xx} - V_{yy})/V_{zz}$ — параметр асимметрии, описывающий отклонение от осевой симметрии.

В нашем случае изменение локальных искажений при замещении учтено в величине параметра V_{zz} , который вычислен из рентгеноструктурных данных. Стоит отметить, что использованный подход не учитывает ковалентного вклада электронов химической связи в величину квадрупольного расщепления. Однако этим вкладом для катиона Fe^{3+} в нашем случае можно пренебречь. Расчетные данные показаны символами на рис. 6. Для образца HoFeO_3 расчетное значение Δ составляет 0.13 мВ при экспериментальной величине 0.30 мВ в парамагнитном состоянии по данным работы [40]. Полученное расхождение с экспериментом мы связываем с валентным вкладом.

3.3. Магнитные измерения

Для выяснения влияния замещения марганца на магнитные свойства $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ были проведены измерения температурных и полевых зависимостей намагниченности, $M(T)$ и $M(H)$. На рис. 7 представлены результаты измерений зависимостей $M(T)$, магнитное поле $\mathbf{H} \parallel \mathbf{b}$. Видно, что при увеличении концентрации марганца температура спин-переориентационного перехода T_{SR} монотонно сдвигается в область высоких температур. Для незамененного образца HoFeO_3 имеем $T_{SR} \approx 58$ К, тогда как $T_{SR} = 294$ К для образца с $x = 0.4$, т. е. T_{SR} находится в области комнатных температур. При этом величина намагниченности M , определяющаяся слабым ферромагнитным моментом из-за скоса антиферромагнитных подрешеток железа, плавно уменьшается с увеличением концентрации Mn (рис. 7a).

Также при увеличении концентрации марганца происходит монотонное уменьшение температуры Нееля T_N в $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ (рис. 7b,c,e) от $T_N = 672$ К для HoFeO_3 до $T_N = 125$ К для $x = 0.7$. Пример определения T_N для образцов с $x = 0.5$,

0.6, 0.7 приведен на рис. 7d (для $x = 0.5$ имеем $T_N = 300$ К). Значения T_N для всех образцов $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ представлены на фазовой диаграмме (рис. 7e). Величина температуры Нееля для $x = 1$ (HoMnO_3) получена в работе [39]. Видно, что в области концентраций $x \approx 0.5$ на зависимости $T_N(x)$ наблюдается перегиб, который может быть связан с изменением доминирующего антиферромагнитного взаимодействия Fe–O–Fe на Mn–O–Mn. Кроме этого, область концентраций $x = 0.4$ –0.5 является предельной, при которой спин-переориентационный переход еще имеет место. Далее с повышением концентрации марганца температура T_N становится ниже T_{SR} , что соответствует фазовому переходу из парамагнитного в антиферромагнитное состояние без дальнейших ориентационных переходов. Также на рис. 7e сплошной красной линией представлена зависимость температуры T_{SR} для различных концентраций марганца рассчитанная по формуле [32]

$$T_{SR}(x) = \frac{1}{k'} \lg \frac{x}{x_c}, \quad (3)$$

где k' — положительная константа, связанная с полем анизотропии второго порядка в плоскостях **ba**, **bc**, **ca**, а x_c характеризует критическую концентрацию, при которой возникает переход в состояние коллинеарного антиферромагнетика (фаза $G_x C_y A_z$). В данной работе рассматривалось изменение констант анизотропии второго порядка, ответственных за температуру спин-переориентационного перехода, при изменении концентрации кобальта в ортоферритах эрбия, гольмия и диспрозия. По нашему мнению, данный формализм [32] может быть успешно применен для описания изменения $T_{SR}(x)$ в $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$. Ранее формула (3) успешно использовалась в работах [19–21].

Известно, что в незамененном соединении HoFeO_3 при спин-переориентационном переходе происходит спонтанный разворот слабого ферромагнитного момента на 90° из направления **b** в **c** в кристалле (для пространственной группы $Pnma$) из фазы $A_x F_y G_z$ в $C_x G_y F_z$ (рис. 8). При этом данный переход является фазовым переходом второго рода [3] (A, C, G — векторы типов антиферромагнитных структур [3], F — ферромагнитной; для ортоферритов основным типом параметра порядка является G -тип антиферромагнетизма с $|G| \gg |F|, |A|, |C|$). Ширина перехода по температуре для HoFeO_3 составляет примерно 10 К, при этом температурного гистерезиса не наблюдается. Следует также упомянуть, что согласно предыдущим работам [45, 46] в чистом HoFeO_3 спиновая переори-

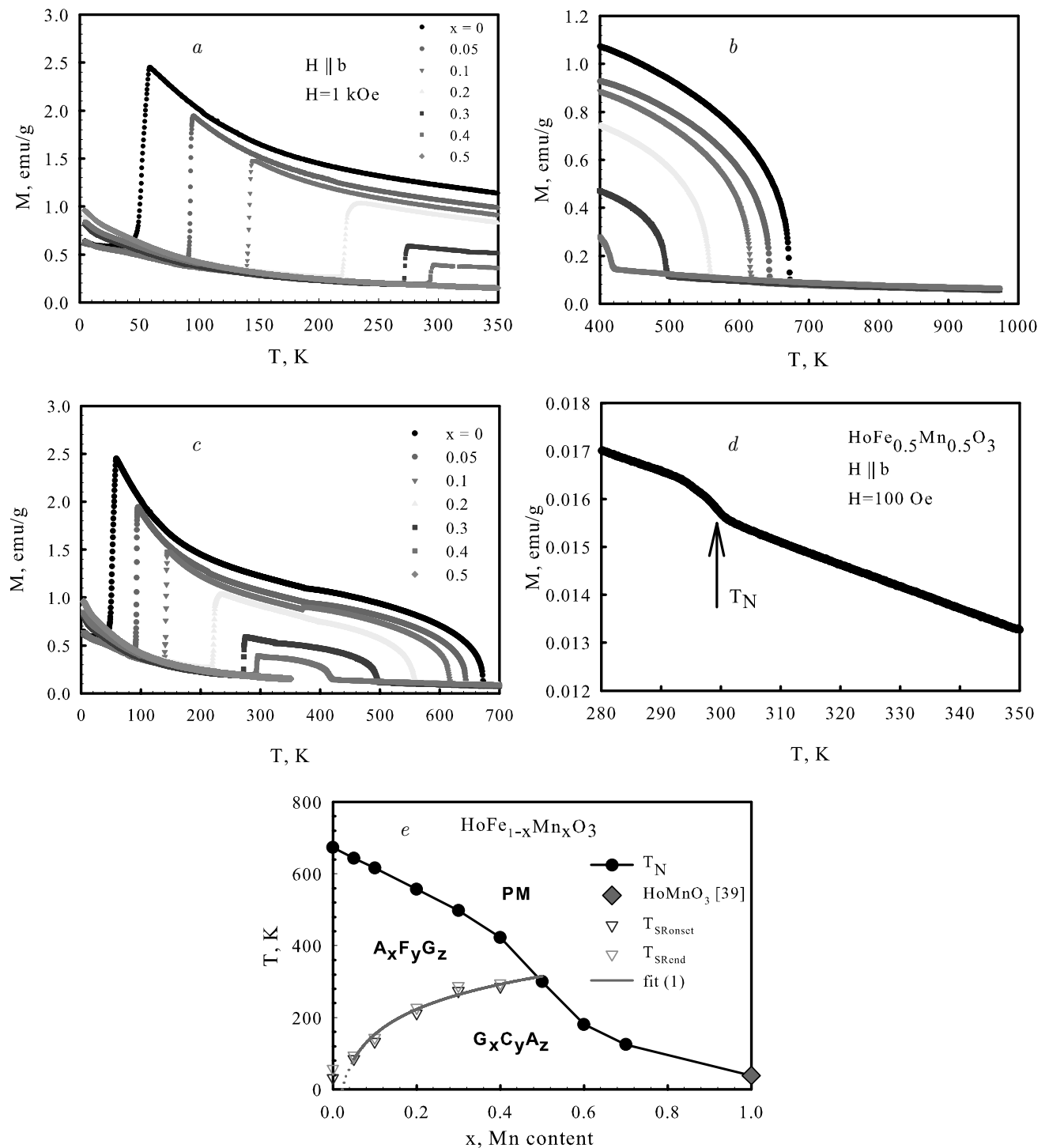


Рис. 7. (В цвете онлайн) Температурные зависимости намагниченности $M(T)$ монокристаллов $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$, измеренные при внешнем магнитном поле $H = 1$ кЭ параллельно оси b кристаллов в температурных диапазонах 4.2–350 К (a) и 400–1000 К (b) и во всем интервале температур 4.2–1000 К (c). d — Пример зависимости $M(T)$ образца $\text{HoFe}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{O}_3$ для определения температуры Нееля T_N для больших концентраций марганца. e — Магнитная фазовая диаграмма $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$, на которой приведены значения температур Нееля T_N , а также температур начала (onset) и конца (end) спин-ориентационного перехода в зависимости от концентрации марганца. Сплошная красная линия — результаты подгонки зависимости $T_{SR}(x)$ с помощью выражения (3)

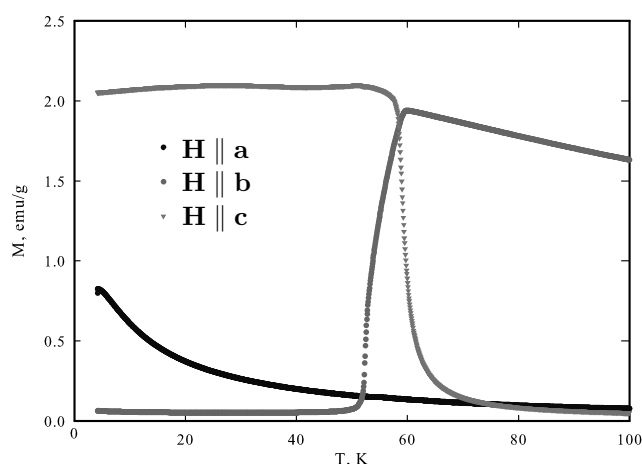


Рис. 8. (В цвете онлайн) Температурные зависимости намагниченности $M(T)$ для HoFeO_3 , измеренные в поле $H = 100$ Э вдоль различных кристаллографических осей

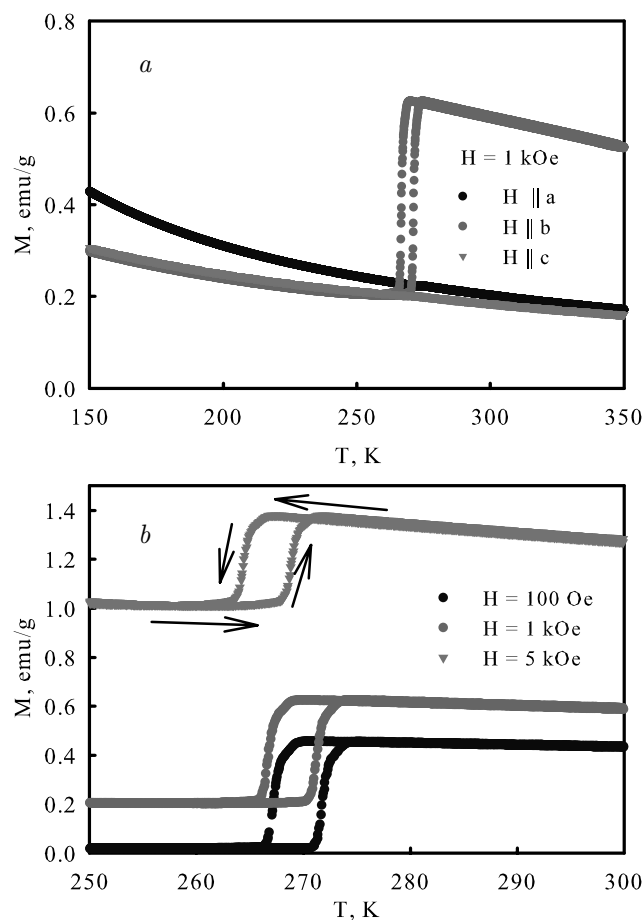


Рис. 9. (В цвете онлайн) *a* — Температурные зависимости намагниченности $M(T)$ для монокристалла $\text{HoFe}_{0.7}\text{Mn}_{0.3}\text{O}_3$ в области спин-переориентационного перехода. *b* — Зависимости $M(T)$, измеренные при различных значениях приложенного магнитного поля $H \parallel b$ в режимах охлаждения и нагрева

ентация между состояниями $A_x F_y G_z$ и $C_x G_y F_z$ (для пространственной группы $Pnma$) происходит более сложным образом в виде трех фазовых переходов: сначала основной вектор антиферромагнетизма $\mathbf{G}$ отклоняется от c - к b -оси в плоскости bc , затем, не доходя до b -оси, скачком переориентируется в плоскость ab и в ней уже поворачивается до конечного состояния вдоль b -оси. В магнитных свойствах обычно проявляется только первая часть (вращение в плоскости bc) этой сложной переориентации, а остальная наблюдается с помощью измерений магнитоупругих свойств и магнитного резонанса.

Совершенно иная картина наблюдается для замещенных образцов. Во-первых, ширина спин-переориентационного перехода для замещенных образцов составляет 4–5 К, как представлено на рис. 7*a,c*, где приведены температурные зависимости намагниченности $M(T)$, измеренные в режиме отогрева. На рис. 9 представлены зависимости $M(T)$ для образца $\text{HoFe}_{0.7}\text{Mn}_{0.3}\text{O}_3$, измеренные в различных магнитных полях и в различных конфигурациях приложенного магнитного поля. На рис. 9*a* видно, что в случае замещенного образца характер спин-переориентационного перехода кардинально изменился. Если для незамещенного HoFeO_3 реализуется переход из фазы $A_x F_y G_z$ в $C_x G_y F_z$ с изменением направления слабого ферромагнитного момента, то в случае $\text{HoFe}_{0.7}\text{Mn}_{0.3}\text{O}_3$ ниже температуры T_{SR} наблюдается скомпенсированная антиферромагнитная фаза от подрешетки железа и марганца. Намагниченность в этом случае определяется только парамагнитным анизотропным вкладом от гольмия, что видно из зависимостей $M(T)$ (рис. 9*a*), измеренных вдоль различных кристаллографических осей. Также нужно отметить, что при циклировании по температуре на зависимостях $M(T)$, измеренных вдоль направления b в различных магнитных полях (рис. 9*b*), наблюдается гистерезис в области спин-переориентационного перехода, ширина которого не зависит от приложенного магнитного поля (до 5 кЭ) и составляет примерно 5 К. Также на рис. 9*b* видно, что приложенное магнитное поле слабо влияет на положение T_{SR} по температуре, начало перехода смещается на 2 К в область низких температур в поле $H = 5$ кЭ, «размытие» перехода при этом не наблюдается. Точно такое же поведение зависимостей $M(T)$ наблюдается для всех замещенных образцов $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$, которые различаются только температурой спин-переориентационного перехода.

На рис. 10 приведены полевые зависимости намагниченности $M(H)$ для образца $\text{HoFe}_{0.8}\text{Mn}_{0.2}\text{O}_3$

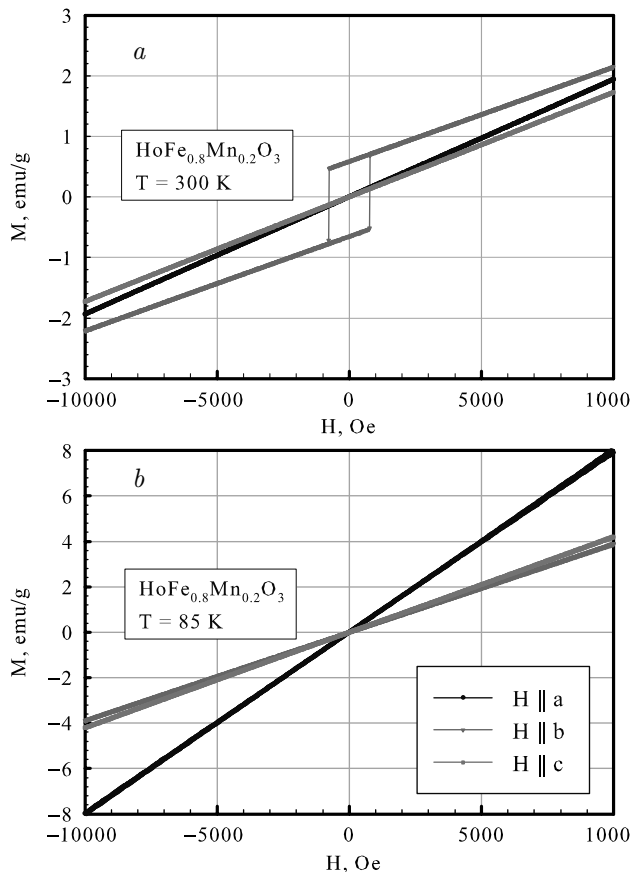


Рис. 10. (В цвете онлайн) Полевые зависимости намагниченности монокристалла $\text{HoFe}_{0.8}\text{Mn}_{0.2}\text{O}_3$, полученные при $T = 300, 85 \text{ K}$

при температурах выше и ниже температуры спин-переориентационного перехода T_{SR} вдоль трех кристаллографических осей. Видно, что ферромагнитный гистерезис на кривой $M(H)$ наблюдается только вдоль направления **b** при $T > T_{SR}$, что соответствует магнитной фазе $A_xF_yG_z$ (рис. 10a). При $T < T_{SR}$ все зависимости $M(H)$ линейны, что соответствует вкладу от коллинеарной антиферромагнитной структуры (фаза $G_xC_yA_z$) без ферромагнитной компоненты. Подобное поведение зависимостей $M(H)$ также наблюдалось нами для всех замещенных образцов.

На рис. 11 представлены зависимости $M(H)$, измеренные при $T = 300 \text{ K}$ для всех образцов $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$, а также значения остаточной намагниченности при $H = 0 \text{ Э}$ и коэрцитивной силы H_{sw} (или поля переключения). «Переключение» намагниченности с нижней ветки на верхнюю происходит в пренебрежимо малом диапазоне полей, что говорит о том, что в образце присутствует только один магнитный домен. Для всех замещенных

образцов при $T = 300 \text{ K}$ присутствует ферромагнитная компонента намагниченности только вдоль направления **b**. При изменении концентрации марганца в образцах появляется возможность плавного варьирования величиной как намагниченности, так и коэрцитивной силы, что может оказаться перспективным для практического использования данной серии монокристаллов в области комнатных температур.

4. ОБСУЖДЕНИЕ

Из анализа поведения зависимостей $M(T)$ можно заключить, что в замещенных марганцем ортоферритах гольмия спин-переориентационный переход относится к фазовому переходу первого рода [3] и определяет изменение магнитного состояния из области слабого ферромагнетизма (фаза $A_xF_yG_z$, магнитный момент вдоль направления **b** кристалла) в область полностью скомпенсированного антиферромагнетика (фаза $G_xC_yA_z$). Подобное изменение характера фазового перехода для соединения $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ наблюдалось в работе [19], где такой вывод был сделан на основании анализа данных порошковой нейтронской дифракции. Также изменение магнитной конфигурации от $A_xF_yG_z \rightarrow C_xG_yF_z$ к $A_xF_yG_z \rightarrow G_xC_yA_z$ наблюдалось для соединения $\text{TbFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ в работе [18], где также использовалась дифракция нейтронов для определения типа магнитного упорядочения. В настоящей работе мы получили аналогичные результаты, основываясь на детальном анализе температурных и полевых зависимостей намагниченности. В то же время остаются открытыми некоторые вопросы магнитного поведения рассматриваемой системы.

До сих пор не уделено внимания механизму и причинам значительного увеличения температуры магнитного спин-переориентационного перехода в системе $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$. Анализ причин роста температуры спин-переориентационного перехода можно провести, основываясь на данных эффекта Мессбауэра. Поскольку в результате замещения части катионов железа происходит изменение орбитального момента на узлах, замещение будет приводить и к изменению величины спин-орбитальной связи. В итоге будет происходить отклонение направления магнитного момента от оси квантования. Это приведет к изменению взаимной ориентацией между ГЭП $\mathbf{V}_{zz}$ и вектором сверхтонкого поля $\mathbf{H}_{hf}$ на ядрах железа. Для случая аксиальной симметрии это изменение описывается следующей зависимостью квадрату-

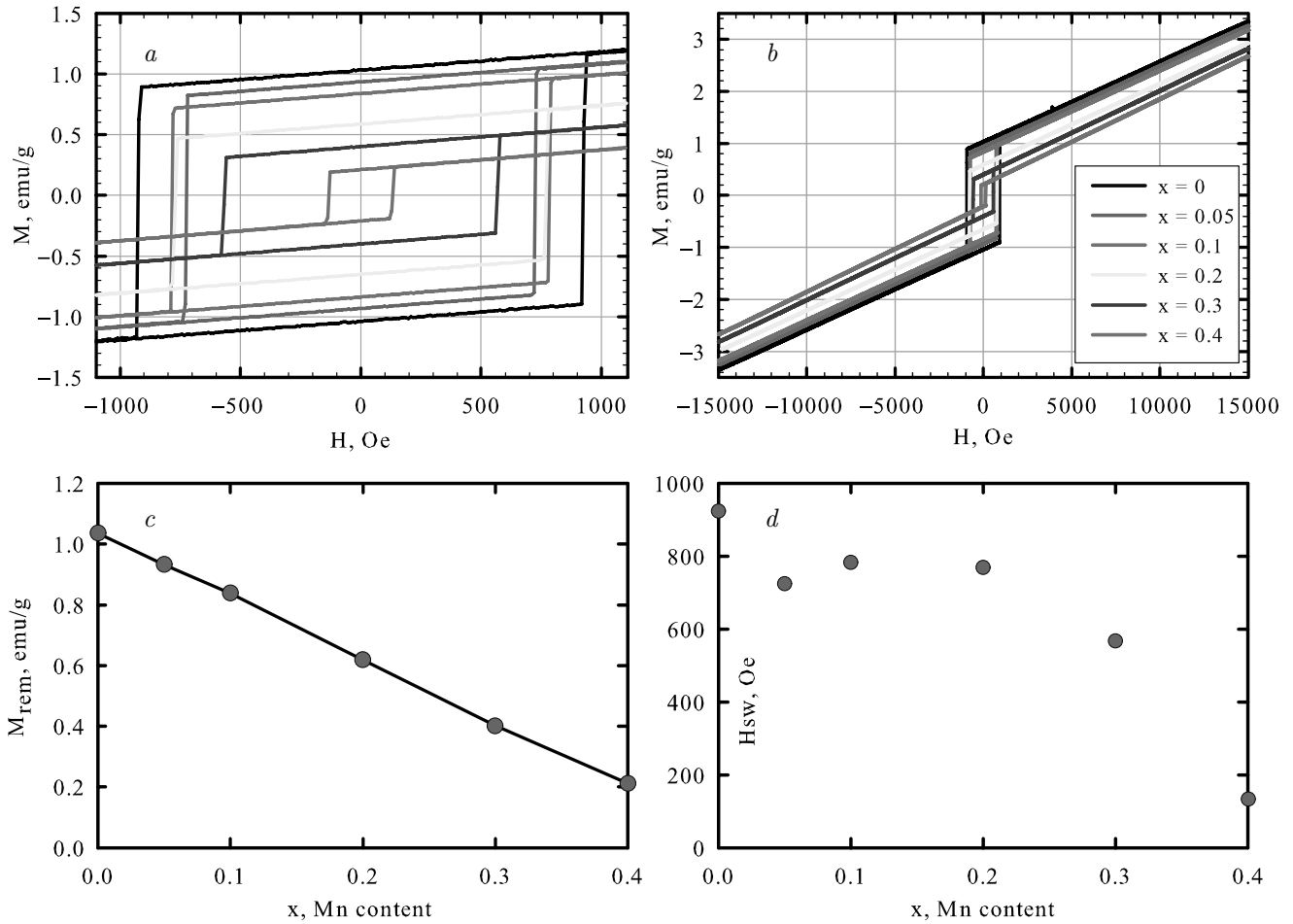


Рис. 11. (В цвете онлайн) Зависимости $M(H)$ при $T = 300$ К для серии образцов $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ (a, b), а также значения величины остаточной намагниченности при $H = 0$ (c) и поля переключения (d) в зависимости от содержания марганца

польного сдвига (2) [37, 47]:

$$\Delta = \frac{e^2}{4} Q V_{zz} \frac{1}{2} (3 \cos^2 \theta - 1). \quad (4)$$

Здесь $Q = 0.21 \cdot 10^{-24} \text{ см}^{-2}$ — квадрупольный момент ядра. По данным магнитных измерений достоверно показано, что температура спин-переориентационного перехода в $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ сильно зависит от степени замещения. При этом кристаллическая структура сохраняется, поэтому можно считать, что квадрупольный момент ядра не изменяется. Это позволяет оценить концентрационную зависимость величины угла θ при замещении, основываясь на экспериментальных данных мессбауэровской спектроскопии и выражении (2).

Таким образом, с учетом полученных по данным рентгеновской дифракции значений V_{zz} мы можем оценить изменение взаимной ориентации векторов $\mathbf{V}_{zz}$ и $\mathbf{H}_{hf}$ при замещении, которое изображено на рис. 12. Этот рисунок наглядно показывает, что ве-

личина угла резко изменяется при концентрации Mn $x = 0.20$. Учитывая известное направление вектора $\mathbf{V}_{zz}$ (см. рис. 3), мы можем показать, что направление магнитного момента (противоположно $\mathbf{H}_{hf}$) становится ближе к плоскости ac кристалла при замещении на Mn (рис. 12). Для объяснения механизма смены типа спиновой переориентации при легировании марганцем можно рассмотреть также вклад ян-теллеровских ионов Mn^{3+} в одноионную анизотропию. В орторомбических манганитах (LaMnO_3 , PrMnO_3 , NdMnO_3) [48, 49] она стабилизирует ориентацию спинов Mn^{3+} вдоль оси в слабоферромагнитной структуре $A_x F_y G_z$, где основным параметром порядка, в отличие от ортоферритов, является А-тип. Наличие такой анизотропии ионов Mn^{3+} , обменно связанных со спинами Fe^{3+} , должно способствовать ориентации последних вдоль оси в антиферромагнитной структуре $G_x C_y A_z$ замещенных составов. Этот механизм стабилизации антиферромагнитной структуры $G_x C_y A_z$ должен работать и для других составов Mn-замещенных ортоферритов.

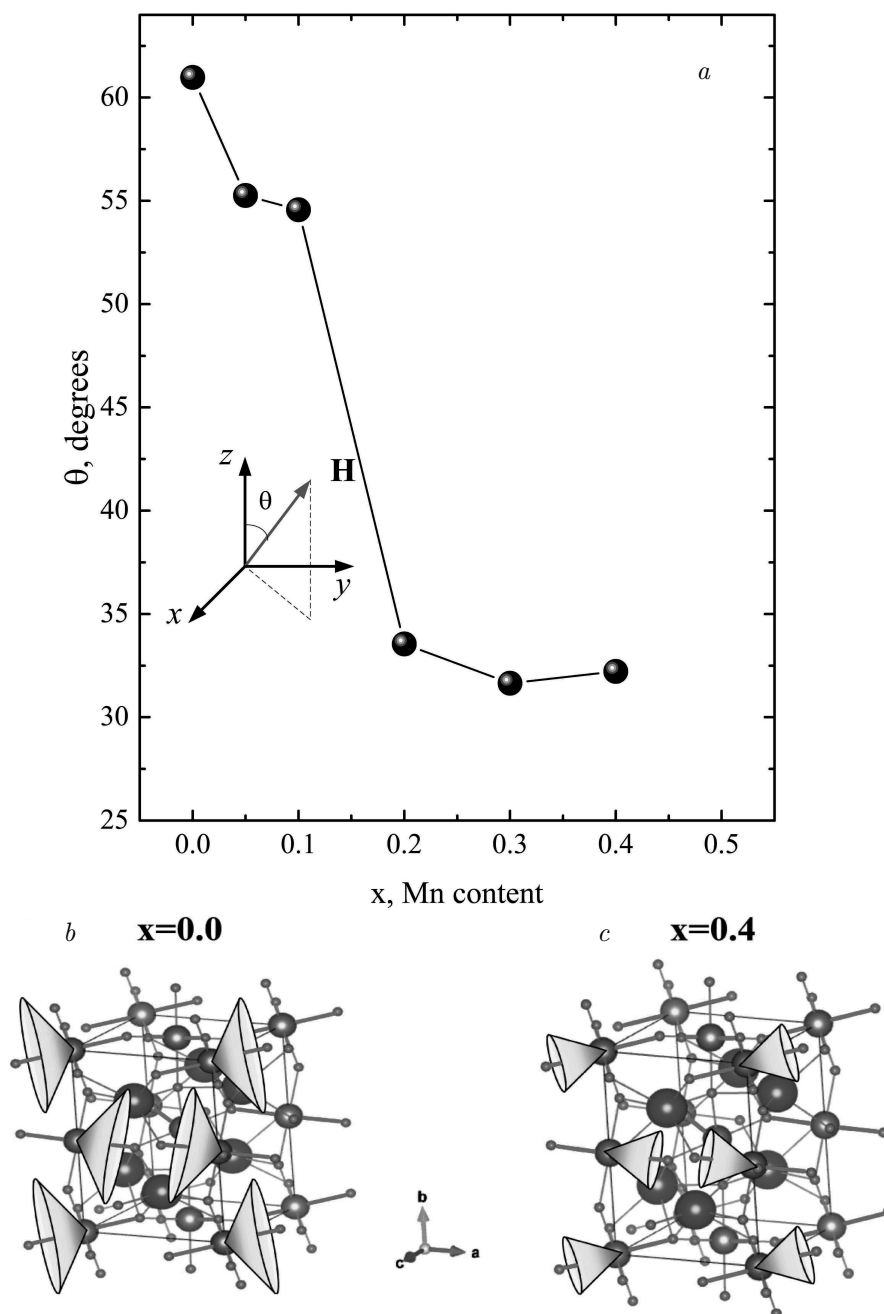


Рис. 12. (В цвете онлайн) *a* — Зависимость изменения угла взаимного расположения векторов главной компоненты ГЭП и сверхтонкого поля на ядрах железа. *b*, *c* — Схематичное расположение векторов сверхтонкого поля (по поверхности конуса) и вектора $\mathbf{V}_{zz}$ (красные жирные линии) для двух концентраций

В работе [19] рассматривалось аналогичное замещение в образцах $\text{TbFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$. Анализируя изменения косвенного обмена в этой системе, авторы отмечают, что при замещении Mn изменяется орбитальная компонента магнитного момента, которая ответственна за формирование магнитной структуры. С учетом наших результатов, полученных с помощью эффекта Мессбауэра, мы можем заключить, что изменение взаимной ориентации векторов $\mathbf{V}_{zz}$

и $\mathbf{H}_{hf}$ при замещении происходит в результате действия эффекта Яна – Теллера. Это приводит к повороту магнитного момента как на катионах Mn, так и на катионах Fe и к уменьшению значения слабого ферромагнитного момента вдоль направления $\mathbf{b}$ кристалла. Такой поворот магнитных моментов подсистемы $3d$ -катионов в $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ может объяснить увеличение температуры спин-переориентационного перехода.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проведен рост серии монокристаллов $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ во всей области концентраций замещающего элемента (Mn) методом оптической зонной плавки. Установлено, что в области концентраций $0.7 < x < 0.8$ наблюдается структурный переход от ромбической ($x < 0.7$) к гексагональной модификации $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$.

Для ромбической модификации $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ проведены магнитные измерения, которые показали, что температура спин-переориентационного перехода T_{SR} значительно увеличивается при увеличении концентрации марганца, и для образца с $x = 0.4$ значение T_{SR} достигает комнатных температур, что важно для практического использования таких замещенных ортоферритов.

Из анализа магнитных измерений установлено, что во всех замещенных образцах спин-переориентационный переход реализуется в виде фазового перехода первого рода из фазы $A_xF_yG_z \rightarrow G_xC_yA_z$ при понижении температуры, тогда как для исходного образца HoFeO_3 такой переход является переходом второго рода из фазы $A_xF_yG_z \rightarrow C_xG_yF_z$.

Увеличение температуры спин-переориентационного перехода можно объяснить уменьшением величины косвенного обмена Fe–O–Fe при замещении железа на марганец, что было экспериментально установлено при исследовании эффекта Мессбауэра.

Финансирование. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-22-10026, <https://rscf.ru/project/23-22-10026/>, Красноярского краевого фонда науки. Исследование магнитных и структурных свойств были выполнены с использованием оборудования Центра коллективного пользования КНЦ СО РАН.

ЛИТЕРАТУРА

1. R. White, *Review of Recent Work on the Magnetic and Spectroscopic Properties of the Rare-Earth Orthoferrites*, J. Appl. Phys. **40**, 1061 (1969).
2. К. П. Белов, А. К. Звездин, А. М. Кадомцева, И. Б. Крынецкий. *О новых ориентационных переходах в ортоферритах, индуцированных внешним полем*, ЖЭТФ **67**, 1974 (1975).
3. К. Белов, А. Звездин, А. Кадомцева, Р. Левитин, *Ориентационные переходы в редкоземельных магнетиках*, Наука, Москва (1979).
4. К. П. Белов, А. К. Звездин, А. А. Мухин, *Магнитные фазовые переходы в ортоферрите тербия*, ЖЭТФ **76**, 1100 (1979).
5. A. Podlesnyak, S. Nikitin, and G. Ehlers, *Low-Energy Spin Dynamics in Rare-Earth Perovskite Oxides*, J. Phys.: Condens. Matter **33**, 403001 (2021).
6. Y. Tokunaga, N. Furukawa, H. Sakai, Y. Taguchi, T. Arima, and Y. Tokura, *Composite Domain Walls in a Multiferroic Perovskite Ferrite*, Nature Mater. **8**, 558 (2009).
7. A. Kimel, A. Kirilyuk, P. Usachev, R. Pisarev, A. Balbashov, and T. Rasing, *Ultrafast Non-Thermal Control of Magnetization by Instantaneous Photomagnetic Pulses*, Nature **435**, 655 (2005).
8. J. De Jong, A. Kimel, R. Pisarev, A. Kirilyuk, and T. Rasing, *Laser-Induced Ultrafast Spin Dynamics in ErFeO_3* , Phys. Rev. B **84**, 104421 (2011).
9. J. Jiang, Z. Jin, G. Song, X. Lin, G. Ma, and S. Cao, *Dynamical Spin Reorientation Transition in NdFeO_3 Single Crystal Observed With Polarized Terahertz Time Domain Spectroscopy*, Appl. Phys. Lett. **103**, 062403 (2013).
10. S. Artyukhin, M. Mostovoy, N. P. Jensen, D. Le, K. Prokes, V. G. De Paula, H. N. Bordallo, A. Maljuk, S. Landsgesell, H. Ryll et al., *Solitonic Lattice and Yukawa Forces in the Rare-Earth Orthoferrite TbFeO_3* , Nature Mater. **11**, 694 (2012).
11. S. E. Nikitin, L. Wu, A. S. Sefat, K. A. Shaykhutdinov, Z. Lu, S. Meng, E. V. Pomjakushina, K. Conder, G. Ehlers, M. D. Lumsden et al., *Decoupled Spin Dynamics in the Rare-Earth Orthoferrite YbFeO_3 : Evolution of Magnetic Excitations Through the Spin-Reorientation Transition*, Phys. Rev. B **98**, 064424 (2018).
12. K. Saito, A. Sato, A. Bhattacharjee, and M. Sorai, *High-Precision Detection of the Heat-Capacity Anomaly Due to Spin Reorientation in TmFeO_3 and HoFeO_3* , Sol. St. Comm. **120**, 129 (2001).
13. A. Ovsianikov, O. Usmanov, I. Zobkalo, V. Hutanu, S. Barilo, N. Liubachko, K. Shaykhutdinov, K. Y. Terentjev, S. Semenov, T. Chatterji et al., *Magnetic Phase Diagram of HoFeO_3 by Neutron Diffraction*, J. Magn. Magn. Mater. **557**, 169431 (2022).
14. J. Leake, G. Shirane, and J. Remeika, *The Magnetic Structure of Thulium Orthoferrite, TmFeO_3* , Sol. St. Comm. **6**, 15 (1968).
15. S. Skorobogatov, K. Shaykhutdinov, D. Balaev, M. Pavlovskii, A. Krasikov, and K. Y. Terentjev, *Spin Dynamics and Exchange Interaction in Orthoferrite TbFeO_3 With Non-Kramers Rare-Earth Ion*, Phys. Rev. B **106**, 184404 (2022).

16. S. Cao, H. Zhao, B. Kang, J. Zhang, and W. Ren, *Temperature Induced Spin Switching in SmFeO₃ Single Crystal*, Sci. Reps. **4**, 5960 (2014).
17. I. Dzyaloshinsky, *A Thermodynamic Theory of «Weak» Ferromagnetism of Antiferromagnetics*, J. Phys. Chem. Sol. **4**, 241 (1958).
18. T. Moriya, *Anisotropic Superexchange Interaction and Weak Ferromagnetism*, Phys. Rev. **120**, 91 (1960).
19. Y. Fang, Y. Yang, X. Liu, J. Kang, L. Hao, X. Chen, L. Xie, G. Sun, V. Chandragiri, C.-W. Wang et al., *Observation of Re-Entrant Spin Reorientation in TbFeO_{1-x}Mn_xO₃*, Sci. Rep. **6**, 33448 (2016).
20. J. Kang, Y. Yang, X. Qian, K. Xu, X. Cui, Y. Fang, V. Chandragiri, B. Kang, B. Chen, A. Stroppa et al., *Spin-Reorientation Magnetic Transitions in Mn-Doped SmFeO₃*, IUCrJ **4**, 598 (2017).
21. W. Fan, H. Chen, G. Zhao, X. Ma, R. Chakaravarthy, B. Kang, W. Lu, W. Ren, J. Zhang, and S. Cao, *Thermal Control Magnetic Switching Dominated by Spin Reorientation Transition in Mn-Doped PrFeO₃ Single Crystals*, Front. Phys. **17**, 33504 (2022).
22. L. Su, X.-Q. Zhang, Q.-Y. Dong, Y.-J. Ke, K.-Y. Hou, H.-t. Yang, and Z.-H. Cheng, *Spin Reorientation and Magnetocaloric Effect of GdFe_{1-x}Mn_xO₃ (0 ≤ x ≤ 0.3) Single Crystals*, Physica B **575**, 411687 (2019).
23. Z. Sun, H. Song, S. Zhu, X. Ma, W. Yang, C. Shi, B. Kang, R. Jia, J.-K. Bao, and S. Cao, *Pr-Doping Effect on Spin Switching in Nd_{0.8}Pr_{0.2}FeO₃ Single Crystal*, J. Phys. Chem. C **127**, 17592 (2023).
24. F.-K. Chiang, M.-W. Chu, F. Chou, H. Jeng, H. Sheu, F. Chen, and C. Chen, *Effect of Jahn–Teller Distortion on Magnetic Ordering in Dy(FeMn)O₃ Perovskites*, Phys. Rev. B **83**, 245105 (2011).
25. R. Vilarinho, D. Passos, E. Queirós, P. Tavares, A. Almeida, M. Weber, M. Guennou, J. Kreisel, and J. A. Moreira, *Suppression of the Cooperative Jahn–Teller Distortion and its Effect on the Raman Octahedra-Rotation Modes of TbMn_{1-x}Fe_xO₃*, Phys. Rev. B **97**, 144110 (2018).
26. P. Mandal, V. S. Bhadram, Y. Sundarayya, C. Narayana, A. Sundaresan, and C. Rao, *Spin-Reorientation, Ferroelectricity, and Magnetodielectric Effect in YFe_{1-x}Mn_xO₃ (0.1 ≤ x ≤ 0.40)*, Phys. Rev. Lett. **107**, 137202 (2011).
27. G. Song, J. Su, S. Fang, J. Tong, X. Xu, H. Yang, and N. Zhang, *Modified Crystal Structure, Dielectric and Magnetic Properties of Cr Doped SmFeO₃ Ceramic*, Physica B **589**, 412185 (2020).
28. Z. Habib, M. Ikram, K. Sultan, Abida, S. A. Mir, K. Majid, and K. Asokan, *Electronic Excitation-Induced Structural, Optical, and Magnetic Properties of Ni-Doped HoFe₃ Thin Films*, Appl. Phys. A **123**, 442 (2017).
29. A. Somvanshi, S. Husain, S. Manzoor, N. Zarrin, N. Ahmad, B. Want, and W. Khan, *Tuning of Magnetic Properties and Multiferroic Nature: Case Study of Cobalt-Doped NdFeO₃*, Appl. Phys. A **127**, 174 (2021).
30. P. Prakash, V. Sathe, C. Prajapat, A. Nigam, P. Krishna, and A. Das, *Spin Phonon Coupling in Mn Doped HoFeO₃ Compounds Exhibiting Spin Reorientation Behaviour*, J. Phys. Cond. Matter **32**, 095801 (2019).
31. S. Yuan, Y. Yang, Y. Cao, A. Wu, B. Lu, S. Cao, and J. Zhang, *Tailoring Complex Magnetic Phase Transition in HoFeO₃*, Sol. St. Comm. **188**, 19 (2014).
32. L. Holmes, L. Van Uitert, and R. Hecker, *Effect of Co on Magnetic Properties of ErFeO₃, HoFeO₃, and DyFeO₃*, J. Appl. Phys. **42**, 657 (1971).
33. G. Durbin, C. Johnson, L. Prelorendjo, and M. Thomas, *Spin Reorientation in Rare Earth Orthoferrites*, J. de Phys. Colloq. **37**, C6 (1976).
34. Y. Sundarayya, P. Mandal, A. Sundaresan, and C. Rao, *Mössbauer Spectroscopic Study of Spin Reorientation in Mn-Substituted Yttrium Orthoferrite*, J. Phys.: Condens. Matter **23**, 436001 (2011).
35. W. Kim, B. Y. Kum, and C. S. Kim, *Spin-Reorientation and Mössbauer Study of Orthoferrite TbFe_{0.75}Mn_{0.25}O₃*, J. Supercond. Nov. Magn. **24**, 867 (2011).
36. D. Ryan, Q. Stoyel, L. Veryha, K. Xu, W. Ren, and S. Cao, *A Single-Crystal Mössbauer Study of Spin Reorientations in the Multi-Ferroic HoFeO₃*, IEEE Trans. Magn. **53**, 1 (2017).
37. P. Gütllich, E. Bill, and A. X. Trautwein, *Mössbauer Spectroscopy and Transition Metal Chemistry: Fundamentals and Applications*, Springer Science and Business Media (2010).
38. N. Lee, Y. Choi, M. Ramazanoglu, I. W. Ratcliff, V. Kiryukhin, and S.-W. Cheong, *Mechanism of Exchange Striction of Ferroelectricity in Multiferroic Orthorhombic HoMnO₃ Single Crystals*, Phys. Rev. B **84**, 020101 (2011).
39. A. Dubrovskiy, N. Pavlovskiy, S. Semenov, K. Y. Terentjev, and K. Shaykhtudinov, *The Magnetostriction of the HoMnO₃ Hexagonal Single Crystals*, J. Magn. Magn. Mater. **440**, 44 (2017).

40. V. J. Angadi, K. Manjunatha, S. Kubrin, A. Kozakov, A. Kochur, A. Nikolskii, I. Petrov, S. Shevtsova, and N. Ayachit, *Crystal Structure, Valence State of Ions and Magnetic Properties of HoFeO₃ and HoFe_{0.8}Sc_{0.2}O₃ Nanoparticles From X-Ray Diffraction, X-Ray Photoelectron, and Mössbauer Spectroscopy Data*, J. Alloys Comp. **842**, 155805 (2020).
41. P. Pina, R. Buentello, H. Arriola, and E. Nava, *Mössbauer Spectroscopy of Lanthanum and Holmium Ferrites*, Hyperfine Interact. **185** 173 (2008).
42. R. Sternheimer, *On Nuclear Quadrupole Moments*, Phys. Rev. **80**, 102 (1950).
43. R. Sternheimer, *On Nuclear Quadrupole Moments*, Phys. Rev. **84**, 244 (1951).
44. L. S. V. R. Marathe, and A. Trautwein, *Sternheimer Shielding Using Various Approximations*, Phys. Rev. A **19**, 1852 (1979).
45. Г. П. Воробьев, А. М. Кадомцева, И. Б. Крынецкий, А. А. Мухин, *О необычном характере спино-вой переориентации в HoFeO₃*, ЖЭТФ **95**, 1049 (1989).
46. А. М. Балбашов, Г. В. Козлов, С. П. Лебедев, А. А. Мухин, А. Ю. Пронин, А. С. Прохоров, *Аномалии высокочастотных магнитных свойств и новые ориентационные переходы в HoFeO₃*, ЖЭТФ **95**, 1092 (1989).
47. I. Lyubutin, P. Naumov, B. Mill, K. Frolov, and E. Demikhov, *Structural And Magnetic Properties of the Iron-Containing Langanite Family A₃MFe₃X₂O₁₄ (A = Ba, Sr; M = Sb, Nb, Ta; X = Si, Ge) observed by Mössbauer spectroscopy*, Phys. Rev. B **84**, 214425 (2011).
48. E. O. Wollan, and W. C. Koehler, *Neutron Diffraction Study of the Magnetic Properties of the Series of Perovskite-Type Compounds [(1 - x)La, xCa]MnO₃*, Phys. Rev. **100**, 545 (1955).
49. J. Hemberger, M. Brando, R. Wehn, V. Y. Ivanov, A. A. Mukhin, A. M. Balbashov, and A. Loidl, *Magnetic Properties and Specific Heat of RMnO₃ (R = Pr, Nd)* Phys. Rev. B **69**, 064418 (2004).

ОСОБЕННОСТИ АНИЗОТРОПИИ УЗКИХ ПОЛОСОК ИЗ ТОНКИХ МАГНИТНЫХ ПЛЕНОК, ОСАЖДЕННЫХ В ПОСТОЯННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Б. А. Беляев^{a,b}, Н. М. Боев^{a,c}, Г. В. Скоморохов^a, П. Н. Соловьев^a,
А. В. Лукьяненко^{a,c}, А. А. Горчаковский^a, И. В. Подшивалов^a, А. В. Изотов^{a,c}*

^a *Институт физики им. Л. В. Киренского
Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия*

^b *Сибирский государственный университет науки и технологий им. М. Ф. Решетнева
660014, Красноярск, Россия*

^c *Сибирский федеральный университет
660041, Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 24 ноября 2023 г.,
после переработки 29 декабря 2023 г.
Принята к публикации 29 декабря 2023 г.

Из пермалловых ($\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}$) пленок толщиной 50, 100 и 200 нм, полученных магнетронным напылением на подложки из кварцевого стекла, методом лазерной литографии изготавливались полоски длиной 20 мм и шириной от 0.1 до 2 мм. В первой серии образцов одноосная магнитная анизотропия, наведенная присутствием во время напыления постоянного магнитного поля в плоскости пленок, ориентирована вдоль длинных осей полосок, а во второй серии ортогонально им. Анизотропные свойства образцов определялись из угловых зависимостей полей ферромагнитного резонанса, измеряемых на сканирующем спектрометре. Обнаружено, что в первой серии образцов с уменьшением ширины полосок анизотропия монотонно увеличивается в несколько раз, почти не изменяя своего направления. У образцов второй серии она сначала уменьшается почти до нуля при определенной ширине полоски, а затем быстро растет, одновременно поворачиваясь на $\sim 90^\circ$. Феноменологический расчет одноосной анизотропии однородно намагниченных пленочных полосок хорошо согласуется с экспериментом.

DOI: 10.31857/S0044451024050092

1. ВВЕДЕНИЕ

Тонкие магнитные пленки (ТМП) на протяжении многих лет привлекают внимание исследователей не только уникальными свойствами [1–3], но и возможностью создания на их основе различных устройств СВЧ-электроники [4–6], а также чувствительных элементов для датчиков слабых магнитных полей [7–9]. Важно отметить, что частотный диапазон работы таких СВЧ-устройств, как правило, ограничивается частотой ферромагнитного резонанса (ФМР) [10]. Однако, согласно уравнению Кит-

теля [11], частота ФМР для тонких пленок с одноосной магнитной анизотропией H_a для случая, когда направление внешнего поля H совпадает с осью легкого намагничивания, определяется выражением

$$\omega_0 = \gamma \sqrt{(H + H_a)(H + H_a + 4\pi M_s)},$$

где γ — гиромагнитное отношение, а M_s — намагниченность насыщения. Заметим, что в общем случае, для выбранного магнитного материала величина M_s остается практически неизменной в широком диапазоне частот. Следовательно, частоту ФМР можно изменять либо внешним магнитным полем, либо полем одноосной анизотропии. Однако использование подмагничивающей системы для создания магнитного поля на практике приводит к увеличению размера и веса конструкции, и, соответственно, к усложнению и удорожанию конечного магнитоэлек-

* E-mail: belyaev@iph.krasn.ru

тронного СВЧ-устройства. Поэтому весьма перспективным подходом является исследование возможностей создания магнитных пленок с заданной величиной поля одноосной магнитной анизотропии под требуемый диапазон рабочих частот магнитоэлектронных устройств. Как известно, существует множество методов формирования одноосной магнитной анизотропии в пленках. Например, она может быть индуцирована внешним магнитным полем, приложенным в плоскости пленки во время осаждения [12, 13] или после ее осаждения в процессе термообработки [14]. В широких пределах можно управлять магнитной анизотропией используя метод наклонного осаждения образцов [15, 16], а также, создавая различными способами упругие напряжения в пленках из магнитострикционных материалов [17, 18].

В последнее время большое внимание исследователей привлекают пленочные структуры, состоящие из полосок микро- и наноразмеров [9, 19–26], получаемых современными литографическими методами. В ряде работ показано, что в микроэлементах вытянутой формы появляется дополнительный вклад в энергию одноосной магнитной анизотропии, обусловленный размагничивающими полями [22, 23, 25]. Исследования особенностей поведения анизотропии от формы полосок и расстояния между ними продемонстрировали возможность управления в таких структурах величиной магнитной анизотропии и, соответственно, частотой естественного ФМР (без постоянного магнитного поля) в широких пределах [21, 26]. Однако размагничивающие поля в таких микрополосках неоднородны, что приводит к возбуждению в них множества дополнительных магнитостатических мод колебаний намагниченности [19, 20, 24], которые не позволяют напрямую использовать исследуемые структуры в магнитоэлектронных устройствах.

В настоящей работе нами исследуются анизотропные свойства локальных участков отдельных пермалловых полосок прямоугольной формы, имеющих различные толщины и различные соотношения их длинных и коротких осей. Такие исследования позволяют не только изучать закономерности поведения анизотропии от ширины полосок, но и продемонстрировать возможности изготовления образцов ТМП с заданной величиной магнитной анизотропии, изменяемой в широких пределах. Особенность работы заключается в том, что исследуемые полоски заданной толщины изготавливались из одной магнитной пленки, а измерение их магнитных характеристик выполнялось с помощью локальной ФМР спектроскопии. Данный подход гарантирует,

что наблюдаемые изменения в магнитных характеристиках полосок различной ширины обусловлены только их геометрией.

2. ОБРАЗЦЫ И МЕТОДИКА ИЗМЕРЕНИЙ

Магнитные пленки осаждались на подложки из кварцевого стекла марки JGS1 толщиной 0.5 мм, шероховатость поверхности которых менее 1 нм. Напыление проводилось на установке «ORION-40 TM» (Южная Корея) методом магнетронного распыления пермалловой мишени $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}$ производства компании «Kurt J. Lesker» с чистотой состава 99.95 %. Как известно, такой пермаллой имеет близкую к нулю магнитострикцию, поэтому в образцах почти не возникает упругих напряжений при их намагничивании в любых направлениях. При напылении пленок давление паров аргона в камере установки составляло 1.8 мбар, а плотность тока магнетрона на мишени составляла 21 мА/см² и обеспечивала скорость осаждения 2.34 Å/с. Скорость осаждения определялась по результатам измерений толщины контрольных пленок с использованием рентгеноспектрального флуоресцентного анализа [27], позволяющего определять толщины образцов с точностью не хуже ± 1 нм, а толщина получаемых пленок рассчитывалась по времени осаждения.

Для создания одноосной магнитной анизотропии в образцах подложки размещались в специальной рамке, собранной из кобальт-самариевых магнитов в медной оправе, создающих однородное магнитное поле в плоскости пленок величиной $H_0 \sim 200$ Э. Это поле в области расположения подложек в ~ 30 раз превышает поле магнетрона, благодаря сравнительно большому расстоянию от мишени до подложек ~ 150 мм. Важно отметить, что подложки во время напыления подогревались до 200° С, что обеспечивало не только высокую адгезию, но и минимальную ширину линии ферромагнитного резонанса в образцах.

Исследования влияния формы пленок на их анизотропные свойства в первом эксперименте проводились на прямоугольных образцах размерами 5×10 мм², осажженных по центру квадратных подложек размерами 12×12 мм². В каждом цикле напыления осаждались одновременно по два образца через соответствующие окна в подложкодержателе. При этом длинная ось одного из окон была ориентирована вдоль постоянного магнитного поля, а другого — перпендикулярно ему (рис. 1 а). В результате одноосная магнитная анизотропия, наведенная в

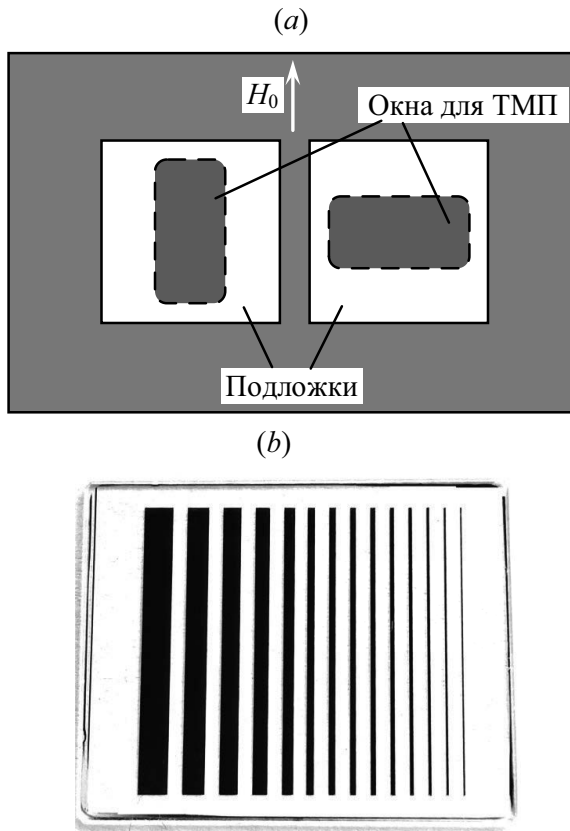


Рис. 1. Вид сверху подложкодержателя — (а) и фотография 14 полосок ТМП, изготовленных лазерной литографией — (b)

плоскости первой пленки (L -образец), ориентирована вдоль ее длинной оси, а второй (S -образец) — вдоль короткой. Описанным способом были изготовлены образцы с толщинами от 20 до 250 нм.

Во втором эксперименте исследовались образцы, осажденные на подложки размерами $24 \times 30 \text{ мм}^2$, двух серий с толщинами в каждой серии 50, 100 и 200 нм. В первой серии во время напыления длинные оси подложек, как и в первом эксперименте, ориентировались вдоль магнитного поля, а второй — перпендикулярно ему. Затем методом лазерной литографии на установке $\mu\text{PG 101}$ фирмы «Heidelberg Instruments» (Германия) на каждой пленке изготавливались химическим травлением 14 полосок одинаковой длины 20 мм, но с убывающей шириной от 2.0 до 0.1 мм, параллельных короткой стороне подложек и расположенных друг за другом с зазорами 1 мм (рис. 1 b). Такие зазоры между полосками с толщинами до 200 нм практически исключают их взаимодействие.

Анизотропные свойства пленочных образцов исследовались методом ферромагнитного резонанса

(ФМР), обладающего высокой точностью особенно в дециметровом диапазоне длин волн [28]. Измерения проводились на сканирующем спектрометре [29, 30], в котором использовались новые измерительные головки [31], значительно увеличивающие его чувствительность. Локальность измерений определяется размером отверстия в головке диаметром 0.8 мм, то есть сигнал ФМР снимается с участка пленки площадью $\sim 0.5 \text{ мм}^2$. Развертка планарного магнитного поля в спектрометре осуществляется с помощью колец Гельмгольца, а спектры записывались на обратном ходе развертки, чтобы исключить гистерезисные явления, причем после каждого поворота образца производилась его намагничивание полем 300 Э. Важно отметить, что направление поля развертки в экспериментах совпадает с направлением лабораторного поля (определяемого в основном полем Земли), которое автоматически учитывается при записи спектров.

По зависимостям резонансного поля H_R , снятым от угла направления постоянного магнитного поля развертки θ_H , определялась эффективная намагниченность насыщения M_{eff} , а также величина H_a и угол направления θ_a поля одноосной магнитной анизотропии измеряемого участка пленки. Для этого использовалась формула, связывающая поле H_R при фиксированной частоте f конкретной измерительной головки с магнитными характеристиками образца [13], исключив из нее ничтожно малое в исследуемых образцах поле однонаправленной анизотропии:

$$\left(\frac{2\pi f}{\gamma}\right)^2 = [H_R \cos(\theta_H - \theta_M) + H_a \cos 2(\theta_a - \theta_M)] \times [4\pi M_{eff} + H_R \cos(\theta_H - \theta_M) + H_a \cos^2(\theta_a - \theta_M)], \quad (1)$$

где равновесное направление θ_M эффективной намагниченности насыщения пленки M_{eff} определяется с учетом уравнения

$$H_R \sin(\theta_H - \theta_M) + \frac{1}{2} H_a \sin 2(\theta_a - \theta_M) = 0, \quad (2)$$

полученного из условия минимума плотности свободной энергии пленки [13].

Для определения параметров магнитных пленок использовалась программа «FMR-extractor» [32], которая позволяет автоматически вычислять магнитные характеристики образцов по измеренным зависимостям $H_R(\theta_H)$, снятым на частоте f СВЧ-колебаний. Эксперименты по исследованию магнитных характеристик ТМП проводились на

измерительной головке с частотой генератора $f = 1.840$ ГГц, при которой H_R превышает поле анизотропии при развертке магнитного поля вдоль оси легкого намагничивания.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

На рис. 2 представлены типичные угловые зависимости $H_R(\theta_H)$ двух пленок размерами 5×10 мм² и толщиной $d = 100$ нм, снятые с локальных участков в центре и вблизи края образцов, обозначенных на вставках рисунка белыми точками. Как показал эксперимент, пленки имеют различную одноосную магнитную анизотропию, так как они осаждались в планарном магнитном поле, направленном либо вдоль их длинных, либо вдоль коротких осей. Поле анизотропии в центре L -образца $H_a^L = 3.8$ Э ($\theta_a^L = 0^\circ$), а в центре S -образца $H_a^S = 3.5$ Э ($\theta_a^S = 90^\circ$).

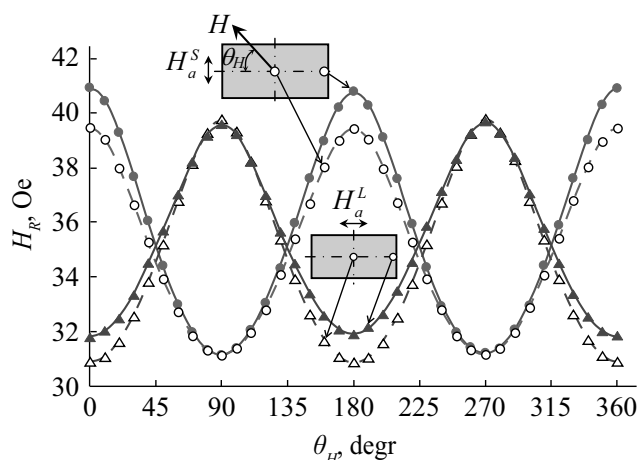


Рис. 2. Угловые зависимости поля ФМР для пленок толщиной 100 нм (точки — эксперимент, линии — расчет)

Наблюдаемое в каждой пленке значительное различие резонансных полей центральных и крайних участков, при ориентации магнитного поля развертки вдоль длинных осей образцов, связано с размагничивающими полями, возникающими на краях пленок, которые, очевидно, в этих точках приводят к увеличению резонансного поля H_R . Учитывая тот факт, что при направлении поля развертки вдоль коротких осей пленок резонансные поля в центре и на краю образцов почти не отличаются, из-за отсутствия в этом случае полей размагничивания, в результате анизотропия для S -образца в крайней точке увеличивается по сравнению с центральной точкой, а для L -образца — уменьшается.

На рис. 3 представлены распределения неоднородностей полей анизотропии (a) и эффективной намагниченности насыщения (b), измеренные по площади этих же образцов с одинаковым шагом 0.5 мм по координатам x и y . Видно, что у пленок такой толщины краевые эффекты, связанные с полями размагничивания, хорошо проявляются на расстояниях более 1 мм. При этом в центре пленок поле одноосной магнитной анизотропии, как уже отмечалось, у L -образца больше, чем у S -образца.

Интересно, что распределения эффективной намагниченности насыщения по площади обоих образцов слабо отличаются друг от друга, а в центрах пленок они абсолютно совпадают и равны $M_{eff} = 994$ ед/см³. Важно отметить, что углы направления одноосной магнитной анизотропии очень слабо изменяются по площади, и лишь вблизи углов пленок они достигают своих максимальных отклонений от средних значений с чередованием знаков этих отклонений на смежных углах образцов $\theta_a^L = 0^\circ \pm 0.9^\circ$, $\theta_a^S = 90^\circ \pm 0.8^\circ$.

Как показали исследования, поле анизотропии, измеренное в центре у L -образцов, всегда больше, чем у S -образцов при любых толщинах пленок d (табл. 1). Из таблицы не только видно, что поле одноосной анизотропии $H_a^L > H_a^S$ для всех толщин пленок, но и что с увеличением d эти поля монотонно уменьшаются, однако их относительное различие увеличивается. Видно также, что эффективная намагниченность пленок с увеличением d монотонно растет. Заметим, что уменьшение поля одноосной магнитной анизотропии и рост M_{eff} с увеличением толщины ТМП ранее было обнаружено на пленках кобальта [13].

Очевидно, что наблюдаемое сравнительно небольшое различие одноосной магнитной анизотропии L - и S -образцов связано с анизотропией прямоугольной формы пленок, у которой длинная сторона l всего в два раза больше короткой стороны s . Поэтому представляет большой интерес исследовать поведение анизотропии образцов с увеличением отношения l/s . С этой целью были рассмотрены две серии прямоугольных образцов-полосок, изготовленных, как уже отмечалось, лазерной литографией по 14 штук в каждой серии с толщинами пленок 50, 100 и 200 нм. Образцы имели одинаковую длину $l = 20$ мм, но различную ширину s , изменяемую в пределах от 2 до 0.1 мм (см. рис. 1 б), для которых отношение l/s изменяется от 10 до 200. При этом в первой серии образцов (L -образцы) наведенная однородным магнитным полем во время напыления одноосная магнитная

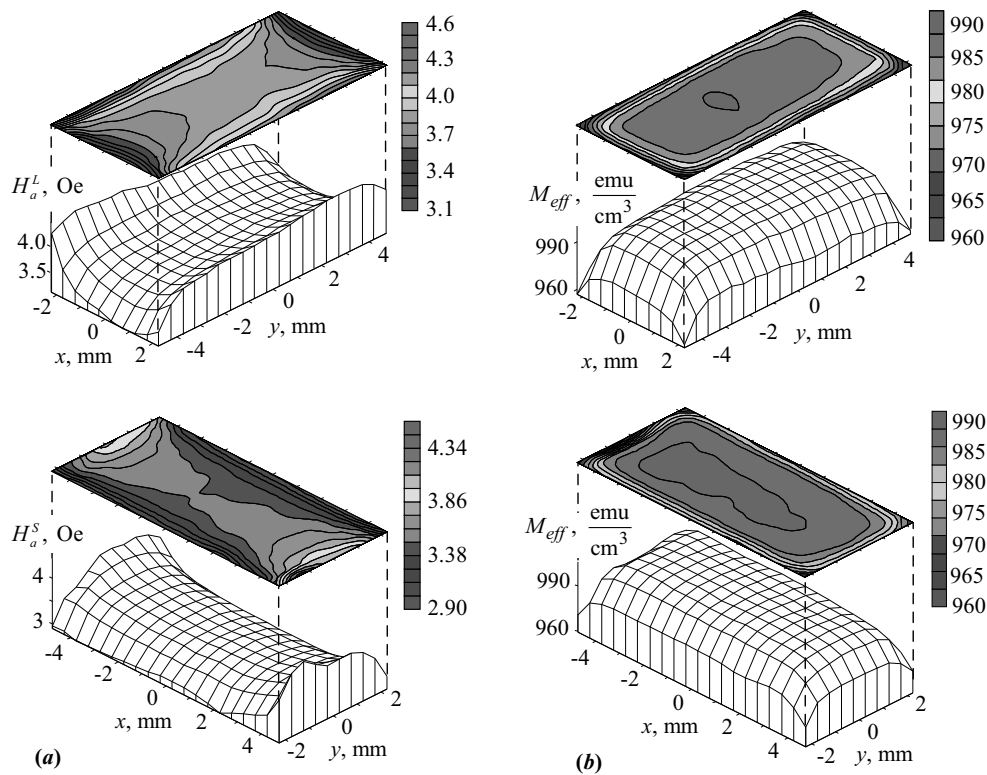


Рис. 3. Распределение неоднородностей одноосной магнитной анизотропии (а) и эффективной намагниченности насыщения (b) по площади для S- и L-образцов толщиной 100 нм

Таблица 1. Параметры одноосной магнитной анизотропии, эффективной намагниченности насыщения и относительной разности полей анизотропии в центре пленок размерами 5 × 10 мм²

d, нм	20	30	70	100	150	200	250
H_a^L/H_a^S ,	5.9/5.8	5.2/5.0	4.4/4.1	3.8/3.5	3.7/3.0	4.0/3.2	3.9/3.1
M_{eff} , е.м.у./см ³	913	935	979	994	1010	1110	1170
$(H_a^L - H_a^S)/H_a^L$, %	1.6	3.8	6.8	7.9	19	20	21

анизотропия направлена вдоль полосок ТМП, а во второй (S-образцы) — перпендикулярно полоскам. Важно отметить, что магнитные характеристики образцов определялись по угловым зависимостям поля ФМР, снятым с локальных участков в центре полосок. При этом в данном эксперименте образцы были ориентированы так, что при $\theta_H = 0$ внешнее магнитное поле направлено вдоль ширины полосок.

На рис. 4 приведены зависимости $H_R(\theta_H)$, снятые для L- и S-образцов с толщиной пленок $h = 100$ нм, имеющих максимальную 2 мм и минимальную 0.1 мм ширину полосок, а также для S-образца при ширине полоски с минимальной одноосной магнитной анизотропией $H_a^S = 0.2$ Э. Видно, что для L-образцов сужение полосок при-

водит к резкому увеличению одноосной магнитной анизотропии. Для S-образцов при сужении полосок анизотропия сначала падает почти до нуля при $s = 0.3$ мм, а затем увеличивается одновременно с поворотом оси легкого намагничивания на 90° . Отметим, что в образце при $s = 0.3$ мм отчетливо проявляется эффективная кубическая анизотропия (анизотропия 4-порядка) $H_4 = 0.3$ Э, немного превышающая одноосную.

В табл. 2 для всех образцов L- и S-серий с толщиной магнитной пленки 100 нм представлены результаты измерений полей анизотропии и эффективной намагниченности насыщения на их центральных участках. Видно, что с уменьшением ширины полосок L-образцов поле H_a^L растет сначала медлен-

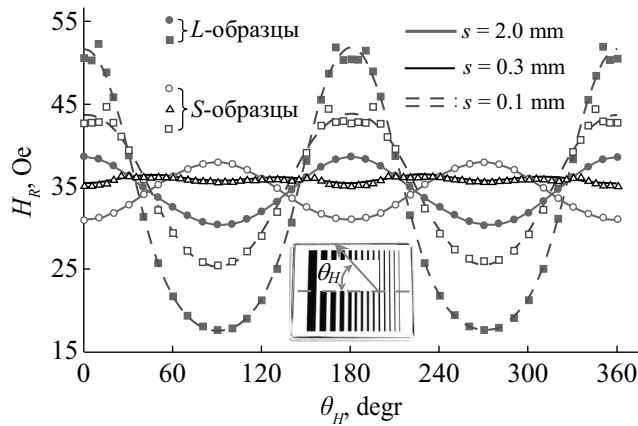


Рис. 4. Угловые зависимости поля ФМР для L - и S -образцов из пленок толщиной 100 нм с различной шириной полосок s (точки — эксперимент, линии — расчет). На вставке показана ориентация поля развертки

но, а начиная с $s < 0.75$ мм, рост ускоряется, и при $s = 0.1$ мм H_a^L превышает поле анизотропии при $s = 2$ мм более, чем в 4 раза. Для S -образцов, напротив, H_a^S сначала уменьшается до минимального значения при $s = 0.3$ мм, а затем быстро увеличивается с одновременным поворотом оси легкого намагничивания на 90° . При этом H_a^S при $s = 0.1$ мм превышает поле анизотропии при $s = 2$ мм более, чем в 2.5 раза. Эффективная намагниченность для каждой пары пленок из обеих серий практически одинакова, и она монотонно уменьшается всего на $\sim 4\%$ с уменьшением ширины полосковых проводников.

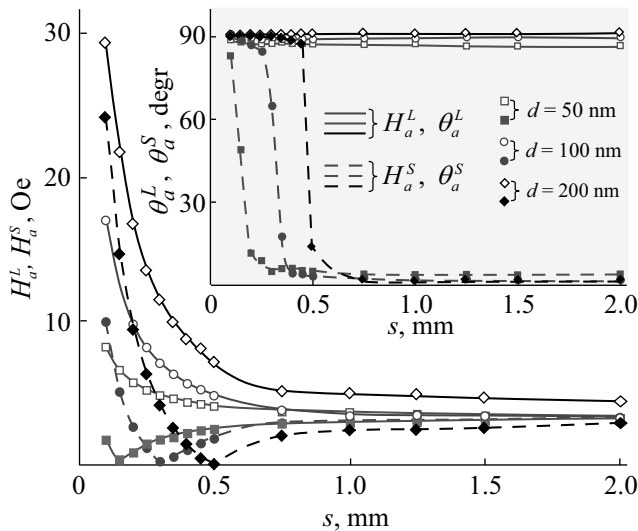


Рис. 5. Зависимости параметров одноосной магнитной анизотропии от ширины полосок s для L - и S -образцов с различной толщиной пленок d

Закономерности поведения полей анизотропии от ширины полосок для образцов с пленками различных толщин хорошо просматриваются на рис. 5. Как и следовало ожидать, анизотропия с уменьшением ширины полосок L -образцов почти не изменяет свое направление при любой толщине пленок, однако ее величина при этом растет, причем чем толще пленка, тем сильнее.

Анизотропия S -образцов при уменьшении ширины полосок изменяет свое направление при определенной ширине, одновременно монотонно поворачиваясь на 90° . При этом величина анизотропии S -образцов сначала уменьшается почти до нуля, а затем вновь растет. Важно отметить, что минимум H_a^S для образца толщиной 50 нм наблюдается при ширине полоски 0.15 мм, для образца толщиной 100 нм, как уже называлось, при ширине полоски 0.30 мм и, наконец, для образца толщиной 200 нм при ширине полоски 0.50 мм.

4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ИССЛЕДОВАНИЯ

Очевидно, что результаты всех проведенных экспериментов можно объяснить размагничивающими полями, существующими на краях пленок. Поэтому рассчитаем эти поля и связанную с ними анизотропию формы реального тонкопленочного образца, аппроксимируя его форму для простоты эллипсоидом. Из магнитостатики хорошо известно, что размагничивающее поле намагниченного эллипсоида однородно во всем его объеме, и при совпадении осей эллипсоида с осями координат, это поле описывается диагональным тензором размагничивающих коэффициентов с компонентами N_x , N_y , и N_z . В общем случае величины этих компонент могут быть рассчитаны только численно. Рассмотрим эллипсоид с осями $2a$, $2b$, и $2c$, лежащими вдоль координатных осей x , y , и z соответственно. Для расчета размагничивающих коэффициентов удобно воспользоваться выражением, полученным Ландау и Лифшицем [33]:

$$N_x = \frac{1}{2} \frac{b}{a} \frac{c}{a} \int_0^\infty \frac{dt}{(t+1)R(t)}, \quad (3)$$

где

$$R(t) = \sqrt{(t+1) \left(t + \frac{b^2}{a^2}\right) \left(t + \frac{c^2}{a^2}\right)}. \quad (4)$$

Таблица 2. Величины одноосной магнитной анизотропии, эффективной намагниченности насыщения и относительной разности полей анизотропии, измеренные в центре полосок толщиной 100 нм от их ширины

<i>s</i> , мм	2.0	1.5	1.25	1.0	0.75	0.5	0.45	0.4	0.35	0.3	0.25	0.2	0.15	0.1
$H_a^L/H_a^S, \text{Э}$	4.1	4.1	4.3	4.3	4.4	5.4	5.7	6.1	6.7	7.4	8.3	9.8	12.1	17.2
$M_{eff}, \text{e.m.u./cm}^3$	3.5	3.3	3.2	3.2	3.1	2.1	1.9	1.4	0.9	0.2	0.9	2.3	4.8	9.2
$(H_a^L - H_a^S)/H_a^L, \%$	990	989	988	980	966	959	958	955	953	952	951	951	952	959
	15	20	26	26	30	61	67	77	87	97	89	77	60	47

Формулы для размагничивающих факторов вдоль двух других направлений N_y и N_z имеют аналогичный вид, но с заменой в формуле (3) члена $(t + 1)$ на $[t + (b/a)^2]$ для определения N_y и на $[t + (c/a)^2]$ для определения N_z .

Магнитную анизотропию формы эллипсоидального образца с намагниченностью насыщения M_{eff} в плоскости xy можно рассчитать по формуле

$$H_d = 4\pi M_{eff}(N_x - N_y), \tag{5}$$

где знак будет показывать направление оси легкого намагничивания этой анизотропии, либо вдоль оси x , либо вдоль оси y .

Результаты проверки применимости приведенных формул для расчета параметров исследуемых полосок представлены на рис. 6 для магнитных пленок толщиной 100 нм. Линиями показаны зависимости параметров одноосной анизотропии от ширины полосок, построенные по формулам (3)–(5). В расчетах эффективная намагниченность насыщения для каждой полоски была взята из табл. 2, а величина наведенной магнитной анизотропии была измерена после напыления пленок на подложки размерами $24 \times 30 \text{ мм}^2$ вдоль их длинных осей в точках, где впоследствии будут располагаться центры полосок. Результаты измерений параметров анизотропии в этих точках представлены треугольными маркерами на рис. 6. Заметим, что величины наведенной одноосной анизотропии у обоих образцов совпадают $H_a^L = 3.7 \text{ Э}$ и $H_a^S = 3.7 \text{ Э}$, так как отношение размеров длинной к короткой оси пленки не превышает 1.2. При этом углы направления осей анизотропии для L -образца близки к 90° , а для S -образца к 0° . Важно также отметить, что отступы от краев подложки крайних полосок более 3.5 мм (см. рис 1b), поэтому краевые эффекты на измерениях параметров анизотропии не проявляются.

Необходимо отметить, что для S -образца расчет показывает изменение направления анизотропии в точке компенсации скачком от 0 до 90° , а в экспериментах (см. рис. 5 и 6) этот угол изменяется плавно,

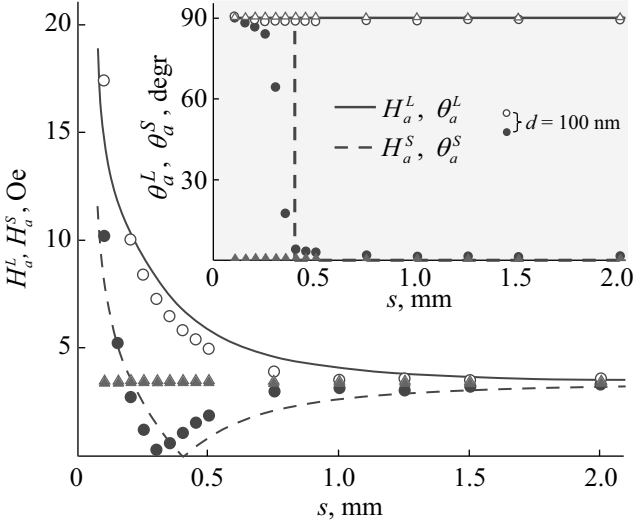


Рис. 6. Зависимости параметров одноосной магнитной анизотропии от ширины полосок s для L - и S -образцов (точки — эксперимент, линии — расчет). Треугольные маркеры показывают параметры анизотропии сплошной пленки (до изготовления полосок), измеренные в тех же точках, где впоследствии будут находиться центры полосок

но, начиная поворачиваться еще до точки компенсации. Очевидно, это связано с тем, что в расчете направление оси легкого намагничивания наведенной магнитной анизотропии совпадает с осью пленки ($\theta_a = 0^\circ$), а в реальных образцах в измеряемых точках θ_a немного больше 0° (см. рис. 5 и 6).

Наблюдаемое на рис. 6 качественное согласие результатов расчета и результатов эксперимента доказывают правомерность использования формул (3)–(5) для описания анизотропии формы исследуемых образцов, в которых, как уже отмечалось, отношение длинных к коротким осям изменяется от 10 до 200. Небольшое различие точки компенсации наведенной магнитной анизотропии при напылении пленок анизотропией формы для S -образца в эксперименте 0.3 мм, а в теории ~ 0.4 мм обусловлено, очевидно, простотой расчетной модели. Отметим, что расчеты, проведенные для образцов с толщиной пле-

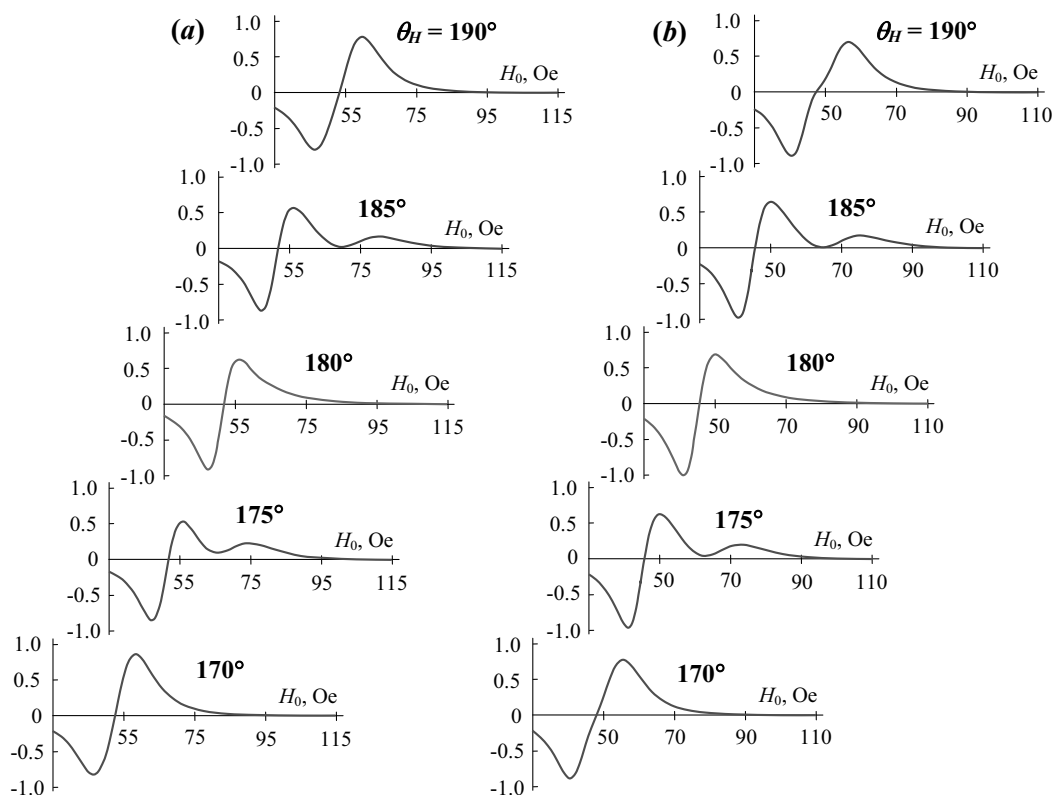


Рис. 7. Спектры ФМР полосок толщиной 100 нм и шириной 0.1 мм, снятые для нескольких углов направления магнитного поля развертки θ_H вблизи трудной оси намагничивания, для L -образца — (a) и для S -образца — (b)

нок 50 и 200 нм, показали такое же качественное согласие теории и эксперимента. Однако в них рассчитанная точка компенсации для образца с $d = 50$ нм равна ~ 0.2 мм (измеренная 0.15 мм), а для образца с $d = 200$ нм равна ~ 0.7 мм (измеренная 0.5 мм). Эти факты говорят о том, что расчет по формулам (3–5), полученным для эллипсоидальной формы образца, завышает поле размагничивания реального образца, причем, чем толще пленка, тем больше это завышение.

Природа наблюдаемых небольших «провалов» резонансного поля на угловых зависимостях узких полосок вблизи осей трудного намагничивания (см. рис. 4) связана с возбуждением некоторого дополнительного резонанса, который и понижает $H_R(\theta_H)$. Положение и амплитуда этого резонанса сильно зависит от угла направления магнитного поля развертки, что хорошо видно на рис. 7. Здесь представлены спектры ФМР, снятые для L - и S -образцов ($d = 100$ нм, $s = 0.1$ мм) при нескольких углах θ_H . Возможно, дополнительный резонанс связан с возбуждением магнитостатических колебаний, которые могут образовывать стоячие волны, за счет отражений волн от противоположных стенок, но только

в узких полосках из-за сравнительно большой величины затухания в исследуемых пленках. Например, для пленки толщиной 100 нм усредненная по углу θ_H ширина линий ФМР, измеренная на частоте 1.840 ГГц, равна 7.06 Э, что соответствует параметру затухания $\alpha = 0.0093$. Выдвинутое предположение подтверждают эксперименты на матрице из пермалловых полосок микронной длины и субмикронной ширины [20, 24], в которых наблюдается множество резонансов магнитостатических волн.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Экспериментально показано, что анизотропия формы тонких магнитных пленок проявляется даже на прямоугольных образцах размерами 5×10 мм² при толщине ТМП всего 20 нм. Как и следовало ожидать, с увеличением толщины пленки эффект растет. Из этих экспериментов возник интерес исследовать влияние анизотропии образцов прямоугольной формы различной толщины при изменении соотношения их осей в широких пределах.

В результате была исследована анизотропия образцов из пермалловых пленок толщиной 50, 100

и 200 нм, изготовленных магнетронным распылением мишени состава $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}$. Напыление пленок проводилось на подложки из кварцевого стекла размером $24 \times 30 \text{ мм}^2$, а затем методом лазерной литографии изготавливались 14 полосок одинаковой длины 20 мм, но с убывающей шириной от 2 до 0.1 мм, параллельных короткой стороне подложек и расположенных друг за другом с зазорами 1 мм (рис. 1 б). Исследовались две серии образцов. В первой серии одноосная магнитная анизотропия, наведенная присутствием во время напыления постоянного магнитного поля в плоскости пленок, ориентирована вдоль длинных осей полосок (L -образцы), а во второй серии ортогонально им (S -образцы). Анизотропные свойства образцов определялись на локальных участках в центрах полосок по угловым зависимостям полей ферромагнитного резонанса $H_R(\theta_H)$, измеряемых на сканирующем спектрометре.

С уменьшением ширины полосок s от 2 до 0.1 мм в первой серии образцов обнаружено монотонное увеличение анизотропии в несколько раз, так как при этом нарастающая анизотропия формы суммируется с наведенной магнитной анизотропией, благодаря совпадению их осей легкого намагничивания. Поэтому направление суммарной анизотропии в образцах первой серии почти не изменяется. У образцов второй серии наведенная магнитная анизотропия ортогональна анизотропии формы образцов, и она в образцах с $s = 2 \text{ мм}$ превышает анизотропию формы. Поэтому с уменьшением s суммарная анизотропия, сначала уменьшается почти до нуля при определенной ширине полоски, а затем быстро растет, одновременно поворачиваясь на $\sim 90^\circ$.

Для определения параметров одноосной анизотропии пленочных полосок использовался феноменологический расчет, в котором рассматривалась модель однородно намагниченного эллипсоида. Результаты расчета качественно согласуются с экспериментом для всех L - и S -образцов. Небольшое различие расчета и эксперимента в ширине полосок, при которых наблюдается взаимная компенсация наведенной магнитной анизотропии и анизотропии формы S -образцов, обусловлено простотой используемой в расчете модели. Показано, что феноменологический расчет для эллипсоидальной формы образца, завышает поле размагничивания, по сравнению с реальным образцом, и при увеличении толщины пленок это завышение растет.

Финансирование. Работа выполнена в рамках научной тематики Госзадания Института физики им. Л. В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН.

ЛИТЕРАТУРА

1. Р. Суху, *Магнитные тонкие пленки*, Мир, Москва (1967).
2. Н. М. Саланский, М. Ш. Ерухимов, *Физические свойства и применение магнитных пленок*, Наука, Новосибирск (1975).
3. K. Barmak, K. Coffey, *Metallic Films for Electronic, Optical and Magnetic Applications: Structure, Processing and Properties*, Woodhead Publ, Oxford (2014).
4. В. А. Беляев, А. О. Афонин, А. В. Угрюмов et al., *Rev. Sci. Instrum.* **91**, 114705 (2020).
5. A. N. Lagarkov, K. N. Rozanov, *J. Magn. Magn. Mater.* **321**, 2082 (2009).
6. R. E. Camley, Z. Celinski, T. Fal et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **321**, 2048 (2009).
7. А. Н. Бабицкий, Б. А. Беляев, Г. В. Скоморохов и др., *Письма в ЖТФ* **41**, 36 (2015).
8. А. Н. Бабицкий, Б. А. Беляев, Н. М. Боев и др., *ПТЭ* **3**, 96 (2016).
9. G. Yu. Melnikov, I. G. Vazhenina, R. S. Iskhakov et al., *Sensors* **23**, 6165 (2023).
10. А. Н. Лагарьков, С. А. Маклаков, А. В. Осипов и др., *РЭ* **5**, 625 (2009).
11. C. Kittel, *Phys. Rev.* **73**, 155 (1948).
12. J. Han-Min, C.-O. Kim, T.-D. Lee et al., *Chinese Phys.* **16**, 3520 (2007).
13. Б. А. Беляев, А. В. Изотов, С. Я. Кипарисов и др., *ФТТ* **50**, 650, (2008).
14. Y. Yang, B. Liu, D. Tang et al., *J. Appl. Phys.* **108**, 073902 (2010).
15. P. N. Solovev, A. V. Izotov, and B. A. Belyaev, *J. Magn. Magn. Mater.* **429**, 45 (2017).
16. Z. Ali, D. Basaula, K. F. Eid et al., *Thin Solid Films* **735**, 138899 (2021).
17. Б. А. Беляев, А. В. Изотов, *ФТТ* **49**, 1651 (2007).
18. Z. K. Wang, E. X. Feng, Q. F. Liu et al., *Physica B: Cond. Matt.* **407**, 3872 (2012).
19. C. Bayer, J. P. Park, H. Wang et al., *Phys. Rev. B* **69**, 134401 (2004).
20. С. Л. Высоцкий, С. А. Никитов, Ю. А. Филимонов и др., *Письма в ЖЭТФ* **88**, 534 (2008).

21. B. K. Kuanr, V. Veerakumar, L. M. Malkinski et al., *IEEE Trans. Magn.* **45**, 3550 (2009).
22. A. Garcia-Arribas, E. Fernandez, A. V. Svalov et al., *Eur. Phys. J. B* **86**, 136 (2013).
23. A. G. Kozlov, M. E. Steblyi, A. V. Ognev et al., *IEEE Trans. Magn.* **51**, 2301604 (2015).
24. E. V. Skorohodov, R. V. Gorev, R. R. Yakubov et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **424**, 118 (2017).
25. A. G. Kozlov, M. E. Steblyi, A. V. Ognev et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **422**, 452 (2017).
26. Z. Zhu, H. Feng, X. Cheng et al., *J. Phys. D: Appl. Phys.* **51**, 045004 (2018).
27. M. Haschke, J. Flock, and M. Haller, *X-ray Fluorescence Spectroscopy for Laboratory Applications*, Wiley-VCH, Weinheim (2021).
28. Б. А. Беляев, А. В. Изотов, *Письма в ЖЭТФ* **103**, 44 (2016).
29. Б. А. Беляев, А. А. Лексиков, И. Я. Макиевский и др., *ПТЭ* **3**, 106 (1997).
30. B. A. Belyaev, A. V. Izotov, and A. A. Leksikov, *IEEE Sensors J.* **5**, 260 (2005).
31. Б. А. Беляев, Н. М. Боев, А. А. Горчаковский и др., *ПТЭ* **2**, 107 (2021).
32. А. В. Изотов, Б. А. Беляев, Свид. о гос. рег. прогр. для ЭВМ №2009616881 (2009).
33. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Наука, Москва (1982).

ВЛИЯНИЕ ВНЕШНЕГО ДАВЛЕНИЯ НА ПОВЕДЕНИЕ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ФАЗЫ ОРГАНИЧЕСКОГО КВАЗИДВУМЕРНОГО ПРОВОДНИКА κ -(BEDT-TTF)₂Hg(SCN)₂Cl. ВКЛАД КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ЭФФЕКТОВ

С. И. Песоцкий^{a*}, Р. Б. Любовский^a, В. Н. Зверев^b, П. Д. Григорьев^{c,d}, Т. И. Могилюк^e,
С. А. Торгунова^a, Е. И. Жилиева^a

^a ФИЦ проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

^b Институт физики твердого тела им. Ю. А. Осипяна Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

^c Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

^d Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»
119049, Москва, Россия

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

Поступила в редакцию 17 ноября 2023 г.,
после переработки 11 декабря 2023 г.
Принята к публикации 22 декабря 2023 г.

Квазидвумерный органический металл κ -(BEDT-TTF)₂Hg(SCN)₂Cl при охлаждении ниже $T = 30$ К переходит в состояние моттовского изолятора. Внешнее гидростатическое давление $P > 0.7$ кбар восстанавливает металлическое состояние и дает возможность исследовать поведение сопротивления, магнитосопротивления и осцилляций Шубникова–де Гааза при гелиевых температурах в интервале внешних давлений $P = 1$ –8 кбар. Спектр наблюдаемых осцилляций Шубникова–де Гааза хорошо согласуется с теоретическими расчетами зонной структуры. В то же время характеристики осцилляций (циклотронная масса, частота, амплитуда) испытывают существенное влияние электронных корреляций. Сильнокоррелированным системам свойственна также специфическая температурная зависимость сопротивления. При этом давление является основным инструментом, управляющим силой корреляций. Обсуждаются различные версии влияния давления на поведение неосциллирующей части магнитосопротивления.

DOI: 10.31857/S0044451024050109

1. ВВЕДЕНИЕ

Органический низкоразмерный металл κ -(BEDT-TTF)₂Hg(SCN)₂Cl (где BEDT-TTF — это бис(этилендитио)-тетрагидрофульвален) принадлежит к хорошо известному классу квазидвумерных проводников, представляющих собой монокристаллические образцы катион-радикальных солей, в

которых плоские органические молекулы BEDT-TTF образуют катионные слои, чередующиеся с неорганическими анионными слоями. При образовании соли на анион уходит электрон с каждой второй молекулы BEDT-TTF. Оставшиеся электроны могут переходить между молекулами BEDT-TTF, осуществляя металлическую проводимость внутри слоев, которая на несколько порядков выше проводимости между слоями [1, 2]. Данный материал в последнее время вызывает повышенный интерес исследователей, обусловленный прежде

* E-mail: pesot@icp.ac.ru

всего экзотическими квантовыми состояниями электронной системы при низких температурах. В частности, в κ -(BEDT-TTF)₂Hg(SCN)₂Cl обнаружены свидетельства реализации состояния дипольной и спиновой жидкости [3–6]. Основной причиной возникновения таких состояний являются особенности кристаллической и электронной структур проводящего слоя. В органических металлах с общей химической формулой (BEDT-TTF)₂X зона проводимости заполнена на три четверти. Однако в металлах с упаковкой молекул BEDT-TTF κ -типа эти молекулы образуют димеры, и зона проводимости расщепляется на полностью заполненную и заполненную наполовину, т.е. металлический перенос идет уже в основном по димерам [7]. Принимая во внимание, что в органических металлах зона проводимости достаточно узкая, порядка 1000 К [8], в димеризованных металлах возникает неустойчивость к переходу в состояние моттовского диэлектрика при понижении температуры. Такой переход определяется соотношением $U/W > 1$, где U — энергия кулоновского отталкивания на одном димере, W — кинетическая энергия электрона в зоне проводимости, в которую входят фермиевская энергия и температура. В классическом случае ниже температуры перехода электроны должны локализоваться на димерах, образуя упорядоченную антиферромагнитную систему. В изучаемом соединении κ -(BEDT-TTF)₂Hg(SCN)₂Cl обнаружен переход металл–диэлектрик при температуре $T \approx 30$ К [6]. Однако в проводящем слое димеры формируют треугольную фрустрированную решетку, что разрушает дальний спиновый порядок и ведет к образованию спиновой жидкости и других квантовых состояний при низких температурах, на исследование которых были направлены основные усилия. В то же время металлическое состояние, возникающее при приложении сравнительно небольшого внешнего гидростатического давления, до сих пор не привлекало достаточного внимания.

Согласно фазовой T – P -диаграмме [6], при давлении $P \geq 0.7$ кбар металлическое состояние κ -(BEDT-TTF)₂Hg(SCN)₂Cl восстанавливается. Анализ квантовых осцилляций Шубникова–де Гааза (ШдГ), наблюдаемых при давлении $P = 0.7$ кбар (рис. 1) [9], показал в фурье-спектре наличие фундаментальных частот F_α и F_β и комбинационной частоты $F_\beta - F_\alpha$, что согласуется с теоретическими расчетами зонной структуры и поверхности Ферми при комнатной температуре [9,10]. Предлагаемая работа посвящена исследованию свойств металлической фазы κ -(BEDT-TTF)₂Hg(SCN)₂Cl при раз-

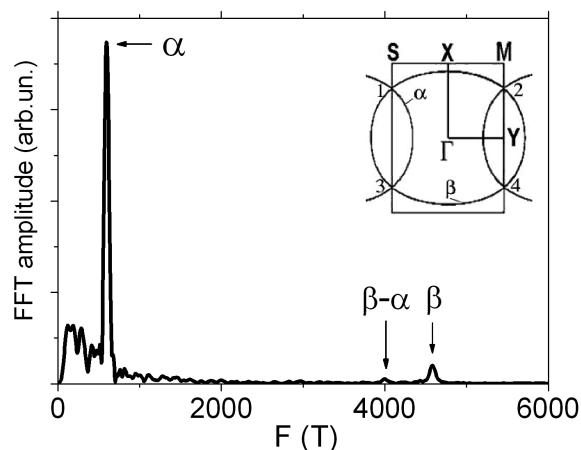


Рис. 1. Фурье-спектр осцилляций ШдГ в κ -(BEDT-TTF)₂Hg(SCN)₂Cl при $P = 0.7$ кбар, $T = 0.5$ К. На вставке: схематическое изображение поверхности Ферми в проводящей плоскости [9]

личных внешних гидростатических давлениях выше 0.7 кбар, обеспечивающих устойчивое состояние такой фазы, и анализу корреляционных эффектов электронной системы.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Сопротивление и магнитосопротивление измерялись стандартным четырехконтактным методом с использованием синхронного детектора на монокристаллических образцах с характерными размерами $0.5 \times 0.3 \times 0.03$ мм³. Измерительный ток частотой 20 Гц, величина которого не превышала 10 мкА, был направлен перпендикулярно проводящим слоям кристалла. Образец монтировался в камеру высокого давления, заполненную кремнийорганической жидкостью, что обеспечивало работу в условиях квазигидростатики до давлений $P = 8$ кбар при низких температурах. Измерения проводились во вставке с откачкой ³He, позволявшей работать в диапазоне температур от комнатной до 0.5 К. Магнитное поле B величиной до 16.5 Тл создавалось сверхпроводящим соленоидом и было направлено по нормали к проводящим слоям вдоль направления тока.

На рис. 2 представлены температурные зависимости межслоевого сопротивления в κ -(BEDT-TTF)₂Hg(SCN)₂Cl в зависимости от внешнего давления. В отсутствие давления при комнатной температуре сопротивление составляет $R \approx 130$ Ом. Приложение давления уменьшает сопротивление до $R \approx 30$ Ом при $P = 8$ кбар. Понижение температуры приводит к монотонному уменьшению сопротивления приблизительно на полтора порядка при гелие-

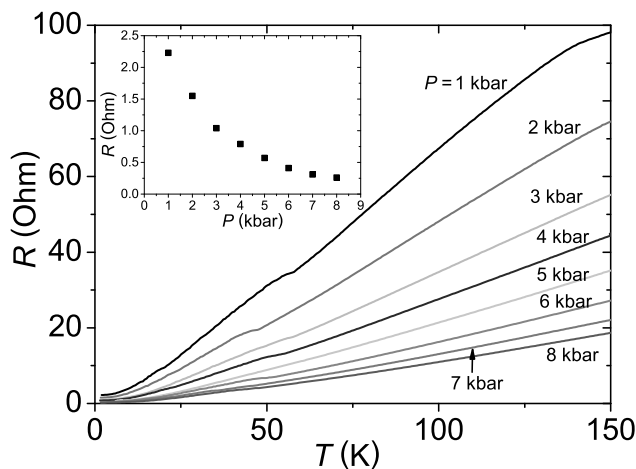


Рис. 2. Температурные зависимости межслоевого сопротивления при различных давлениях. На вставке: зависимость сопротивления при $T = 2$ К от давления

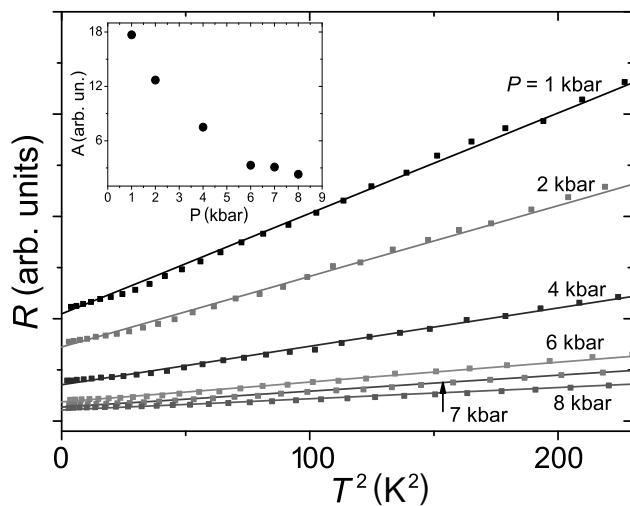


Рис. 3. Зависимости сопротивления от квадрата температуры при различных давлениях. На вставке: зависимость коэффициента A в формуле (1) от давления

вых температурах. В интервале температур 2–15 К при всех давлениях сопротивление неплохо описывается соотношением (рис. 3)

$$R(T) = R_0 + AT^2. \quad (1)$$

Поведение магнитосопротивления в зависимости от давления представлено на рис. 4.

При минимальном давлении $P = 1$ кбар кривая полевой зависимости сопротивления имеет положительную кривизну и хорошо описывается соотношением

$$R(B) = R(0) + bB^n,$$

где $n \approx 2$, во всем интервале полей. Увеличение давления приводит к тому, что в больших полях n уменьшается, и при давлении $P \approx 5$ кбар степенная зависимость вырождается в почти линейную.

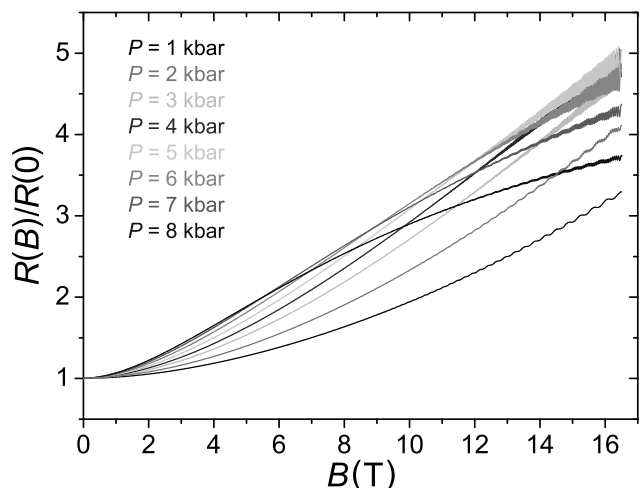


Рис. 4. Полевые зависимости межслоевого сопротивления при различных давлениях при $T = 0.5$ К. Поле направлено перпендикулярно проводящим слоям

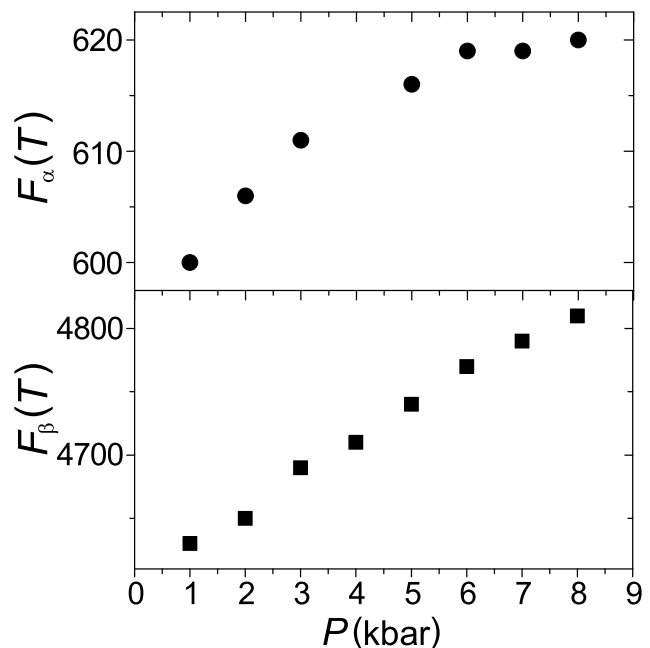


Рис. 5. Зависимости частот α - и β -осцилляций ШдГ от давления

При еще больших давлениях зависимость приобретает отрицательную кривизну в полях $B > 5$ Тл. При всех давлениях в полях $B > 9$ Тл наблюдаются квантовые осцилляции ШдГ, пример фурье-спектра которых представлен на рис. 1. Зависимости частот F_α и F_β и соответствующих амплитуд α - и β -осцилляций ШдГ от приложенного давления показаны на рис. 5 и 6. Обе частоты монотонно растут при увеличении давления до 8 кбар примерно на 3–4%. Напротив, зависимости амплитуд от давления немонотонны и демонстрируют почти нулевую амплитуду: для β -частоты при $P = 1$ кбар и для α -частоты при

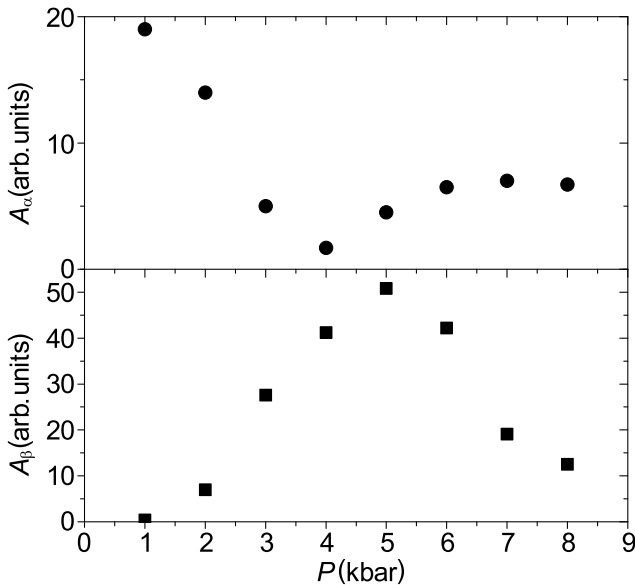


Рис. 6. Зависимость амплитуд α - и β -осцилляций ШдГ от давления при $T = 0.5$ К

$P = 4$ кбар. На рис. 7 показаны зависимости циклотронных масс α - и β -осцилляций от давления. Величины масс определялись из температурных зависимостей амплитуды соответствующих осцилляций. Обе массы приблизительно линейно зависят от обратного давления (вставка на рис. 7) и уменьшаются на 7–8% при увеличении давления до 8 кбар.

3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Температурная зависимость межслоевого сопротивления в органическом металле κ -(BEDT-TTF)₂Hg(SCN)₂Cl демонстрирует металлическое поведение при атмосферном давлении. При температуре $T \approx 30$ К наблюдается переход металл–изолятор, интерпретируемый как переход мотовского типа [6]. Давление $P > 0.7$ кбар подавляет переход, восстанавливает металлическое состояние, что позволяет наблюдать особенности температурных зависимостей сопротивления при различных давлениях вплоть до гелиевых температур (см. рис. 2). К таким особенностям следует отнести квадратичную зависимость сопротивления от температуры (1), характерную для электрон-электронного рассеяния (см. рис. 3). Вклад такого рассеяния обычно в нормальных металлах невелик, однако в низкоразмерных органических металлах, в которых $U \sim W$, подобное явление встречается достаточно часто [11] и является одним из признаков сильных электронных корреляций. Приложение внешнего давления ослабляет корреляции, уменьшая коэффициент A , в основном за счет увеличения кинетической энергии W , вызванной гидростатическим сжатием

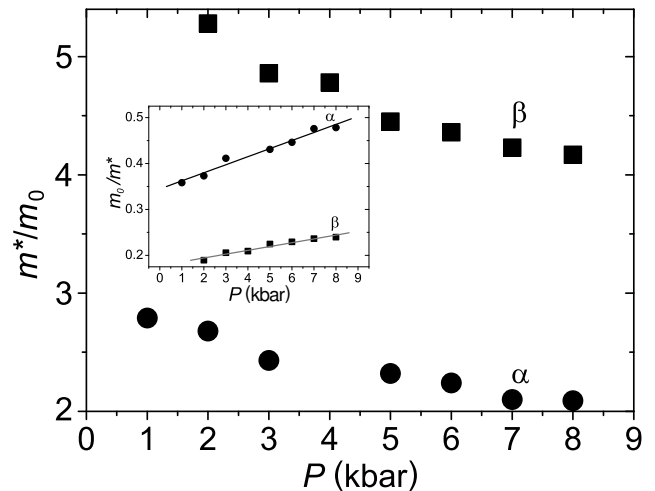


Рис. 7. Зависимости циклотронных масс α - и β -осцилляций ШдГ от давления. На вставке: зависимости обратных циклотронных масс α - и β -осцилляций ШдГ от давления

кристаллической решетки. Увеличение давления до 8 кбар уменьшает A почти на порядок (см. вставку на рис. 3).

3.1. Магнитосопротивление (неосциллирующая часть)

Металлическое состояние электронной системы соединения κ -(BEDT-TTF)₂Hg(SCN)₂Cl обеспечивает наблюдение магнитосопротивления, характерного для сильноанизотропных квазидвумерных металлов. Изначально можно было ожидать корневую зависимость продольного магнитосопротивления в больших полях, $\Delta R/R(0) \propto B^{1/2}$ [12], свойственной большинству органических слоистых металлов. Однако при малых давлениях наблюдается степенная зависимость с показателем степени $n \approx 2$ даже в максимально доступных полях. Два сценария представляются разумными для объяснения такого поведения.

Первый сценарий. Принимая во внимание сочетание большой величины продольного магнитосопротивления, $\Delta R(16 \text{ Тл})/R(0) \sim 3\text{--}5$ (см. рис. 4), и «металлического» характера температурной зависимости сопротивления $R(T)$, можно предположить, что межслоевой зарядовый перенос в κ -(BEDT-TTF)₂Hg(SCN)₂Cl осуществляется в некогерентном режиме через резонансные примеси [13, 14]. (Следует заметить, что важную дополнительную информацию о режиме межслоевого транспорта можно получить из угловых зависимостей магнитосопротивления [8], однако такие исследования представляют собой отдельную весьма сложную задачу.) В этом случае движение электронов поперек слоев также включает их движение вдоль проводящих слоев [14].

Проводимость вдоль слоев квадратично зависит от перпендикулярного слоям магнитного поля, что дает квадратичное продольное магнитосопротивление по крайней мере в полях, для которых $\omega\tau_c < 1$, где ω — циклотронная частота, τ_c — время жизни электрона между столкновениями. Приложение внешнего давления уменьшает эффективную массу электронов (рис. 7) и сопротивление (см. вставку на рис. 2), также, вероятно, увеличивая τ_c . Это приводит к увеличению $\omega\tau_c$ и, следовательно, сдвигает интервал квадратичного магнитосопротивления в сторону меньших полей, что и наблюдается на рис. 4.

Второй сценарий. В этом сценарии при туннелировании электронов между соседними слоями j и $j + 1$ при малой скорости растекания заряда вдоль слоя возникает аналог экситона: на слое j будет дырка, а на слое $j + 1$ — избыточный электрон. Между ними будет кулоновское притяжение с энергией E_c . Магнитное поле локализует электроны в слое и замедляет их растекание, что усиливает их кулоновское взаимодействие $E_c \sim e^2/r$. Радиус локализации r порядка ларморовского радиуса r_L и обратно пропорционален магнитному полю B . Это приводит к сильному магнитосопротивлению [15]. Однако в металлах с высокой проводимостью скорость растекания заряда настолько велика, что за время $\tau \ll \hbar/E_c$ ($\hbar$ — постоянная Планка) такой экситон распадется, и этот эффект «кулоновского полярона» будет несущественен. Чем ближе к моттовскому переходу, тем ниже проводимость в слое, а значит, тем больше время τ существования такого экситона и его влияние на межслоевую проводимость по аналогии с эффектом, изучаемым в работе [16]. Таким образом, в металлической фазе (при высоком давлении) этот источник продольного магнитосопротивления $\Delta R(B)/R(0)$ не играет роли, но при низком давлении, когда скорость диссоциации экситона недостаточно высока, он может давать заметный вклад.

3.2. Осцилляции Шубникова – де Гааза

В полях $B > 9$ Тл при всех давлениях наблюдались осцилляции ШдГ. Спектр осцилляций при давлении $P = 1$ кбар содержит две фундаментальные частоты, $F_\alpha \approx 600$ Тл и $F_\beta \approx 4630$ Тл (пример спектра при $P = 0.7$ кбар представлен на рис. 1). Он хорошо согласуется с теоретическими расчетами зонной структуры и поверхности Ферми для слоистых органических металлов с упаковкой катионного слоя κ -типа [11]. Исходная дырочная β -орбита, охватывающая 100% первой зоны Бриллюэна (ПЗБ) (два электрона на элементарную ячейку), испытывает отражение при пересечении границы зо-

ны, формируя при этом вторую дырочную α -орбиту, площадью 13% ПЗБ (см. вставку на рис. 1). В точках пересечения границ зоны 1, 2, 3, 4 между этими орбитами возникает щель, которая, вообще говоря, должна стремиться к нулю вследствие наличия центра инверсии в исследуемых кристаллах [17]. Однако факт сосуществования обеих частот осцилляций ШдГ при всех давлениях указывает на ненулевую величину такой щели. Наиболее вероятной причиной этого является спин-орбитальное взаимодействие [17]. Таким образом, в магнитном поле возникают магнитопробойная β -орбита с четырьмя магнитонробойными переходами и замкнутая α -орбита с двумя отражениями в области перехода.

На рис. 7 представлены зависимости циклотронных масс m_α^* и m_β^* , соответствующих α - и β -осцилляциям, от давления. Давление уменьшает массы, сохраняя их соотношение $m_\beta^*/m_\alpha^* \approx 2$ в соответствии с теоретическими расчетами [18]. Общее выражение для обеих циклотронных масс неплохо описывается соотношением

$$m^* \propto (P - P_0)^{-1}, \quad (2)$$

где $P_0 \approx -20$ кбар для обоих типов осцилляций (вставка на рис. 7). Этот результат можно сравнить с аналогичным теоретическим соотношением для эффективной массы в сильнокоррелированных металлах вблизи перехода металл–изолятор, учитывающим перенормировку зонной массы за счет электрон-фоновых корреляций [19, 20]:

$$m^* \propto (1 - u/u_0)^{-1}. \quad (3)$$

Здесь $u = U/t$ — сила электронных корреляций, где U — кулоновское отталкивание электронов на одном димере, t — интеграл электронного переноса между ближайшими димерами, u_0 — критическая корреляционная сила, при достижении которой происходит переход металл–изолятор. Соотношения (2) и (3) выглядят эквивалентными при условии линейной зависимости корреляционной силы u от давления и слабой зависимости от давления вклада электрон-фононного взаимодействия в циклотронную массу. Свидетельства линейной зависимости $u(P)$ были представлены в работе [20]. Они были получены при исследовании органического металла κ -(BEDT-TTF)₂Cu[N(CN)₂]Cl. Однако следует иметь в виду, что диапазон давлений в этой работе не превышал 2 кбар. Зависимость от давления перенормировки циклотронной массы за счет электрон-фононного взаимодействия оценивалась в работе [21] при изучении органического металла κ -(BEDT-TTF)₂Cu(NCN)₂. Приведены аргументы в

пользу малого влияния давления на вклад этого взаимодействия по сравнению с электрон-электронным вкладом. Таким образом, есть основания полагать, что уменьшение циклотронной массы в κ -(BEDT-TTF)₂Hg(SCN)₂Cl с повышением внешнего давления идет главным образом за счет ослабления электронных корреляций.

На рис. 5 изображены зависимости частот α - и β -осцилляций от давления. Частоты растут монотонно на 3–4% в результате уменьшения элементарной кристаллической ячейки и, как следствие, увеличения площади ПЗБ. Однако заметны незначительные качественные и количественные различия в поведении $F_\beta(P)$ и $F_\alpha(P)$. Они также могут быть связаны с корреляционными эффектами. В работе [21] отмечается, что электрон-фононное взаимодействие не влияет на форму орбиты и размер площади, охватываемой ею. В то же время электрон-электронное взаимодействие меняет форму, сохраняя размер. Для β -орбиты изменение формы не сказывается на размере площади — она при всех давлениях равна 100% площади ПЗБ и растет в соответствии с изменением размеров элементарной ячейки. Напротив, α -орбита, являющаяся частью β -орбиты (см. вставку на рис. 1), будет слабо менять размер площади при изменении формы β -орбиты и, соответственно, частоту $F_\alpha(P)$ по мере ослабления корреляций с ростом внешнего давления. Зависимость амплитуды осцилляций ШдГ от внешнего давления для α - и β -орбит изображена на рис. 6. В интервале давлений $P = 1$ –8 кбар обе амплитуды испытывают радикальные изменения вплоть до обращения практически в нуль. Выражение для амплитуды осцилляций магнитосопротивления в двумерной электронной системе имеет вид [22]

$$A \propto R_T R_D R_{MB} R_S. \quad (4)$$

В частности, для β -орбиты можно воспользоваться следующими соотношениями:

$$R_T \approx \frac{2C\mu^*T}{B} \exp\left(-\frac{C\mu^*T}{B}\right)$$

при условии

$$C\mu^*T [\text{К}]/B [\text{Тл}] > 2,$$

где $C = 14.69 [\text{Тл/К}]$, $\mu^* = m^*/m_0$ — приведенная циклотронная масса, m_0 — масса свободного электрона;

$$R_D = \exp\left(-\frac{C\mu^*T_D}{B}\right),$$

где T_D — температура Дингла;

$$R_{MB} = \exp\left(-2\frac{B_0}{B}\right)$$

с учетом четырехкратного прохождения магнитопробойной щели, где B_0 — магнитопробойное поле;

$$R_S = \cos\left(\pi \frac{g^*\mu_b^*}{2}\right),$$

где g^* — g -фактор, перенормированный электрон-электронным взаимодействием, μ_b^* — циклотронная масса без электрон-фононного вклада. Таким образом, выражение (4) может быть для β -орбиты сведено к выражению

$$A \propto \frac{R_S}{B} \exp\left(-\frac{B^*}{B}\right), \quad (5)$$

где эффективное поле

$$B^* = C\mu^*(T + T_D) + 2B_0.$$

Из этого выражения видно, что давление может значительным образом повлиять на амплитуду β -осцилляций, существенно изменяя температуру Дингла и/или величину магнитопробойного поля. На рис. 8 представлена зависимость эффективного поля B^* от давления при $T = 0.5$ К. Хорошо видно, что во всем интервале давлений эффективное поле меняется несущественно. Поэтому, скорее всего, можно исключить эффект заметного воздействия давления на амплитуду осцилляций через изменения величины магнитопробойной щели, пропорциональной $B_0^{1/2}$, или температуры Дингла. Таким образом, можно считать, что в соотношении (4) первые три множителя не участвуют в наблюдаемых значительных изменениях амплитуды осцилляций. Остается четвертый множитель R_S , так называемый спиновый понижающий множитель, связанный с зеемановским расщеплением

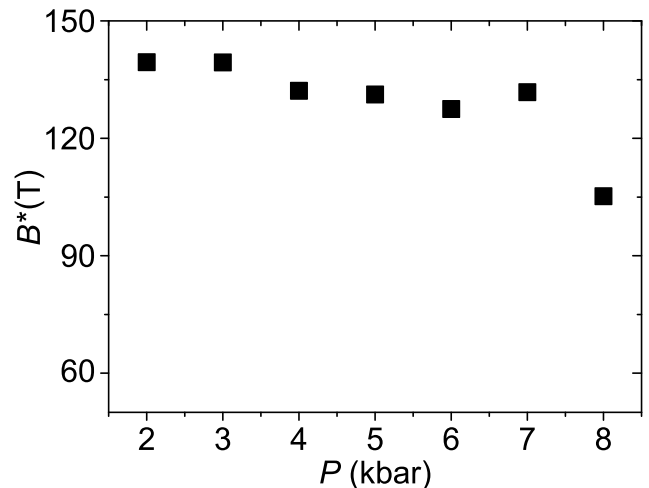


Рис. 8. Зависимость эффективного поля от давления при $T = 0.5$ К

уровней Ландау. Его величина напрямую зависит от циклотронной массы, и он периодически обращается в нуль, образуя так называемые «спиновые нули» при условии

$$g^* \mu_b^* = 2n + 1,$$

где n — целое число [22]. По всей вероятности, именно этот механизм ответственен за значительные изменения амплитуд α - и β -осцилляций, возникающие в результате ослабления электронных корреляций.

Таким образом, можно считать установленным существенное влияние сильных электронных корреляций на характеристики квантовых осцилляций, присущих ферми-жидкости, такие как частота осцилляций, амплитуда, циклотронная масса. Поддержкой этому утверждению может служить анализ теоретического соотношения, полученного для сильнокоррелированных систем [23],

$$\frac{A}{\gamma^2} \propto a, \quad (6)$$

где A — коэффициент при T^2 в формуле (1), γ — коэффициент при линейной части температурной зависимости теплоемкости, a — параметр элементарной кристаллической ячейки. В очень грубом приближении

$$\gamma \propto \frac{1}{E_F} \propto \frac{m^*}{F},$$

где E_F — энергия Ферми, а F — частота осцилляций. Параметр a обратно пропорционален корню из частоты осцилляций:

$$a \propto \frac{1}{F^{1/2}}.$$

Теперь выражение (6) принимает вид

$$A \propto \frac{m^{*2}}{F^{5/2}}.$$

На рис. 9 представлена зависимость коэффициента $A(P)$ от $Y(P) = m^{*2}(P)/F^{5/2}(P)$ для β -осцилляций при различных давлениях, которая удовлетворительно согласуется с теоретической зависимостью (6) и служит подтверждением существенной роли корреляционных эффектов в металлических свойствах органического металла κ -(BEDT-TTF)₂Hg(SCN)₂Cl при подавленном моттовском переходе.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Органический квазидвумерный металл κ -(BEDT-TTF)₂Hg(SCN)₂Cl при охлаждении и нормальном давлении испытывает переход металл–изолятор моттовского типа при температуре

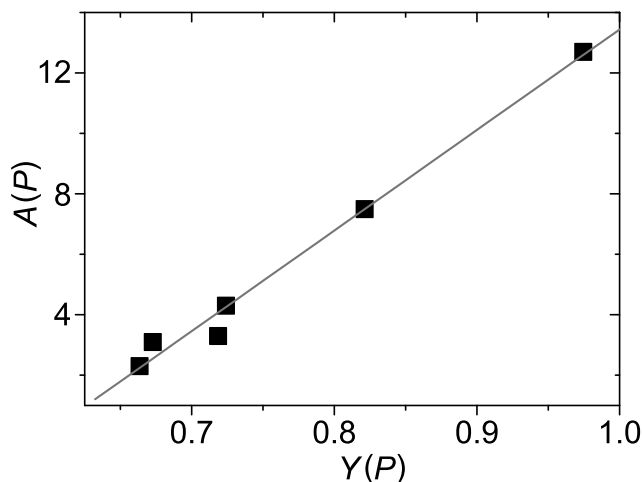


Рис. 9. Зависимость коэффициента $A(P)$ от $Y(P) = m^{*2}(P)/F^{5/2}(P)$ для β -осцилляций при различных давлениях. A и Y в произвольных единицах

$T \approx 30$ К. Приложение внешнего давления $P > 0.7$ кбар подавляет переход металл–изолятор, восстанавливая металлическое состояние, которое соответствует теоретическим расчетам электронной структуры при комнатной температуре. Это подтверждается наблюдением квантовых осцилляций магнитосопротивления. Анализ неосциллирующей части магнитосопротивления показал, что межслоевой зарядовый перенос идет, скорее всего, в некогерентном режиме и при малых давлениях может дополнительно ограничиваться влиянием поляронов, возникающим в магнитном поле. Эффективная циклотронная масса уменьшается с ростом давления за счет главным образом ослабления силы корреляций взаимодействующих электронов. Такое уменьшение отражается на зависимости от давления амплитуды осцилляций, которая демонстрирует резкие минимумы — так называемые спиновые нули. Зависимость частоты осцилляций также предполагает участие в ней корреляционных эффектов, ослабевающих с ростом давления. Таким образом, электрон–электронные взаимодействия прямо или косвенно оказывают заметное влияние на основные характеристики осцилляций ШдГ в сильнокоррелированной электронной системе κ -(BEDT-TTF)₂Hg(SCN)₂Cl.

Финансирование. Работа выполнена в рамках госзадания FFSG-2024-0009 (С. И. П., Р. Б. Л., С. А. Т., Е. И. Ж.) и проекта РФФИ № 21-52-12027 (П. Д. Г., Т. И. М.). Работа одного из авторов (П. Д. Г.) поддержана госзадаанием «Теоретическое исследование новых эффектов в физике конденсированного состояния вещества» (FFWR-2024-0015).

ЛИТЕРАТУРА

1. J. M. Williams, J. R. Ferraro, R. J. Thorn et al., *Organic Superconductors (Including Fullerenes) Synthesis, Structure, Properties and Theories*, Prentice-Hall Inc. (1992).
2. H. Ishiguro, K. Yamaji, and G. Saito, *Organic Superconductors*, Springer, Berlin (1998).
3. N. Hassan, S. Cunningham, M. Mourigal et al., *Science* **360**, 1101 (2018).
4. N. Drichko, R. Beyer, E. Rose et al., *Phys. Rev. B* **89**, 075133 (2014).
5. N. M. Hassan, K. Thirunavukkuarasu, Z. Lu et al., *npj Quant. Mater.* **5**, 15 (2020).
6. A. Lohle, E. Rose, S. Singh et al., *J. Phys: Condens. Matter* **29**, 055601 (2017).
7. T. Mori, H. Mori, and S. Tanaka, *Bull. Chem. Soc. Jpn* **72**, 179 (1999).
8. M. V. Kartsovnik, *Chem. Rev.* **104**, 5737 (2004).
9. Р. Б. Любовский, С. И. Песоцкий, В. Н. Зверев и др., *Письма в ЖЭТФ* **112**, 623 (2020) [R. B. Lyubovskii, S. I. Pesotskii, V. N. Zverev et al., *JETP Lett.* **112**, 582 (2020)].
10. A. C. Jacko, E. P. Kenny, and B. J. Powell, *Phys. Rev. B* **101**, 125110 (2020), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.125110>.
11. J. Wosnitza, *J. Low Temp. Phys.* **146**, 641 (2007).
12. P. D. Grigoriev, *Phys. Rev. B* **88**, 054415 (2013).
13. A. A. Abrikosov, *Physica C* **317-318**, 154 (1999).
14. M. V. Kartsovnik, P. D. Grigoriev, W. Biberacher et al., *Phys. Rev. B* **79**, 165120 (2009).
15. P. D. Grigoriev, *Physica B* **407**, 1932 (2012).
16. Л. С. Левитов, А. В. Шитов, *Письма в ЖЭТФ* **66**, 200 (1997) [L. S. Levitov and A. V. Shytov, *JETP Lett.* **66**, 214 (1997)].
17. S. M. Winter, K. Riedl, and R. Valent, *Phys. Rev. B* **95**, 060404(R) (2017).
18. J. Merino and R. H. McKenzie, *Phys. Rev. B* **62**, 2416 (2000).
19. A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth et al., *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13 (1996).
20. S. Oberbauer, S. Erkenov, W. Biberacher et al., *Phys. Rev. B* **107**, 075139 (2023).
21. J. Caulfieldt, W. Lubczynskits, F. L. Prattty et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **6**, 2911 (1994).
22. D. Shoenberg, *Magnetic Oscillations in Metals*, Cambridge Univ. Press (1984).
23. R. H. McKenzie, arXiv: cond-mat/9802198.

ПОВЕДЕНИЕ СМЕСЕЙ АКТИВНЫХ И ПАССИВНЫХ НЕМАТИКОВ В ОГРАНИЧЕННОЙ ДВУМЕРНОЙ КРУГЛОЙ ОБЛАСТИ

*Л. В. Миранцев**

*Институт проблем машиноведения Российской академии наук (ИПМАШ РАН)
199178, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 5 октября 2023 г.,
после переработки 17 января 2024 г.
Принята к публикации 18 января 2024 г.

С помощью простой молекулярной модели пассивных, активных нехиральных и хиральных нематиков проведено моделирование методами молекулярной динамики поведения их бинарных смесей в двумерной ограниченной области, имеющей форму круга. Изучены равновесные структуры в этих системах при нормальном и тангенциальном сцеплении частиц на границах. Показано, что в смесях, состоящих из пассивных и активных модельных частиц, а также в смесях активных частиц с различной хиральностью при достаточно больших самодвижущих силах содержащая их ограниченная область разбивается на кластеры, преимущественно состоящие из частиц одного вида. Для характеристики степени разделения смесей на эти кластеры вводится параметр их сегрегации. Вычисляются значения этого параметра при различных величинах самодвижущих сил и хиральности модельных частиц.

DOI: 10.31857/S0044451024050110

1. ВВЕДЕНИЕ

Активными системами называются естественные или искусственные системы, которые не находятся в состоянии термодинамического равновесия из-за энергии, передаваемой образующим их частицам либо извне, либо за счет внутренних химических процессов [1]. Примерами активных систем являются живые существа (птицы, рыбы, бактерии и пр.) Также активные системы могут быть созданы искусственным путем из объектов, использующих световую или химическую энергию. Важнейшей особенностью активных систем является существование в них коллективного движения, когда группы самодвижущихся частиц движутся как единое целое в масштабах, значительно превышающих размеры отдельных частиц. Изучение механизма и динамики таких коллективных движений имеет большую важность для исследования природных систем в широком интервале масштабов. Особый интерес представляют так называемые хиральные активные системы, состоящие из частиц с нарушенной зеркальной симметрией, и, особенно, хиральные актив-

ные нематики, обладающие дальним ориентационным порядком [2]. В настоящее время проводятся многочисленные экспериментальные и теоретические исследования хиральных активных нематиков в ограниченных пространствах с заданными граничными условиями на границах. Большинство теоретических исследований подобных систем [3–5] проводилось в рамках континуальных феноменологических моделей, использующих такие понятия, как тензор ориентационного порядка $\mathbf{Q}$ и поле скоростей течения $\mathbf{u}$. В этих работах исследовались пространственно-временное поведение структуры поля директора $\mathbf{n}$ и топологических дефектов активных нематиков в двумерных круглых областях при различных величинах радиуса R этих областей и различных граничных условиях. Также исследовалась зависимость поведения активных нематиков от такого феноменологического параметра, как величина активного напряжения α (active stress strength). Однако при рассмотрении поведения реальных активных систем, состоящих из микроскопических или наноскопических активных частиц (например, суспензий микротубул и моторных белков [1]), довольно сложно сопоставить феноменологический параметр α с характеристиками этих частиц. Пространственные ограничения являются важным фактором, определяющим различные свойства активных систем, на-

* E-mail: mlv@ipme.ru

пример, структуру течений в них и образование спиральных вихрей [3, 6–12]. Такие ограничения также могут быть использованы в практических приложениях, например, для управления живыми и искусственными самодвижущимися микроскопическими объектами [13–15].

Особый интерес представляет поведение активных систем, являющихся смесями различных активных частиц, заключенных в микроскопических областях с ограничивающими поверхностями [16]. Влияние ограничивающих поверхностей может привести к особому поведению таких смесей. В работе [16] исследовалось поведение бинарной смеси самодвижущихся и взаимодействующих друг с другом дисков с различными радиусами, заключенных внутри двумерной квадратной области. С помощью численного решения уравнений Ланжевена, описывающих движение этих дисков, были получены степень агрегации различных частиц у ограничивающих стенок, а также параметр их сегрегации. Очевидно, что подобная модель весьма далека от более или менее правдоподобной модели активных нематиков, состоящих из самодвижущихся частиц, имеющих продолговатую форму. С ее помощью также невозможно исследовать поведение ориентационного порядка в смесях таких частиц.

В работах [17, 18] нами была предложена довольно простая микроскопическая модель активных хиральных нематиков, и с помощью моделирования методами молекулярной динамики (MD) исследовалось их поведение в двумерных круглых и кольцеобразных ограниченных областях с различными граничными условиями. Было показано, что при не очень больших активных самодвижущих силах, действующих на частицы в таких системах, их структура и расположение в них топологических дефектов качественно совпадают с результатами упомянутых выше феноменологических моделей [3–5]. В связи с этим нами была использована эта же модель для MD-моделирования поведения бинарных смесей активных и пассивных нематиков, а также смесей активных нематиков с различной хиральностью в двумерной круглой области с ограничивающими поверхностями с нормальным и тангенциальным сцеплением частиц с ними. Была исследована зависимость этого поведения от геометрических и силовых характеристик модельных частиц.

2. МОДЕЛЬ

Для частиц активного нематика были использованы весьма простые модели, изображенные на рис. 1.

Изотропная часть взаимодействия между частицами рассматриваемого активного, а также пассивного нематика описывается с помощью короткодействующего парного потенциала Леннарда-Джонса (LJ)

$$U_{LJ}(r_{ij}) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (1)$$

который использовался в наших более ранних работах [19–21]. Здесь ϵ и σ — соответственно, энергетическая константа и характерная длина LJ-взаимодействия i -й и j -й частиц, r_{ij} — расстояние между ними. Анизотропная часть взаимодействия между этими частицами описывается следующим потенциалом типа Майера–Заупе:

$$U_{anis}(r_{ij}, \theta_{ij}) = -\epsilon_{anis} \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta_{ij} - \frac{1}{2} \right) \frac{\sigma^6}{r_{ij}^6}, \quad (2)$$

где ϵ_{anis} — энергетическая константа анизотропного взаимодействия, θ_{ij} — угол между длинными осями i -й и j -й частиц. Взаимодействие между частицами смеси и границами двумерной круглой области, в которую она помещена, также описывается потенциалами, аналогичными потенциалам (1) и (2), в которых константы взаимодействия ϵ , ϵ_{anis} и σ заменяются на константы взаимодействия ϵ_2 , ϵ_{anis2} и σ_2 . Кроме того, на каждую из активных частиц действует самодвижущая реактивная сила $\mathbf{f}_0$, компоненты которой вдоль осей x и y равны

$$f_{0x} = f_0 e_x \cos \phi + f_0 e_y \sin \phi, \quad (3)$$

$$f_{0y} = f_0 e_y \cos \phi - f_0 e_x \sin \phi, \quad (4)$$

где $\mathbf{e}$ — единичный вектор, направленный вдоль длинной оси частицы, ϕ — угол между $\mathbf{e}$ и $\mathbf{f}_0$. Кроме того, в случае хиральных частиц самодвижущая реактивная сила $\mathbf{f}_0$ создает действующий на частицу дополнительный вращающий момент $\tau_0 = f_0 \delta \sin \phi$ относительно ее центра масс. Для нехиральных частиц угол ϕ в формулах (3) и (4) необходимо положить равным нулю, а дополнительный вращающий момент просто отсутствует. Положение в пространстве и ориентация i -й частицы активного или пассивного нематика определялись путем численного решения следующих уравнений движения:

$$\frac{\partial^2 \mathbf{r}_i}{\partial t^2} = \frac{\mathbf{f}_i}{m}, \quad (5)$$

$$\frac{\partial \mathbf{e}_i}{\partial t} = \boldsymbol{\omega}_i \times \mathbf{e}_i, \quad (6)$$

$$\partial \boldsymbol{\omega}_i / \partial t = \boldsymbol{\tau}_i / I. \quad (7)$$

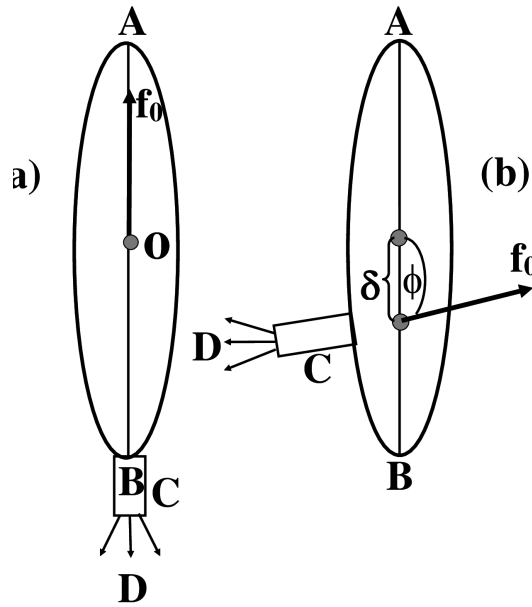


Рис. 1. Модели нехиральной (a) и хиральной (b) частиц активного нематика, используемые в нашем MD-моделировании: AB — длинная ось частиц; O — их центр массы; C — отросток, обеспечивающий способность частиц к самодвижению (боковой отросток обеспечивает ее хиральность); D — некая струя, которая выбрасывается из этого отростка и вследствие которой создается самодвижущая реактивная сила f_0 (в случае хиральной частицы она приложена к точке O_1 и направлена под углом ϕ к длинной оси частицы); δ — расстояние между точкой приложения силы f_0 и центром масс частицы

Здесь $\mathbf{f}_i$ и $\boldsymbol{\tau}_i$ — полная сила и полный момент, действующие на i -ю частицу со стороны других частиц на ограничивающей поверхности, а также самодвижущие сила и момент; $\boldsymbol{\omega}_i$ — угловая скорость вращения вектора $\mathbf{e}_i$; m и I — масса и момент инерции частицы соответственно. MD-моделирование проводилось на NVT -ансамблях, и на каждом временном шаге уравнения движения решались с помощью стандартного алгоритма [22], а приведенная температура системы T/ϵ поддерживалась постоянной и равной 0.9 с помощью термостата [22]. Для описания ориентационного порядка частиц внутри круглой области нами были введены радиальный Q_R и тангенциальный Q_T параметры порядка, которые определялись как

$$Q_R = \frac{1}{N} \sum_i |\mathbf{e}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_i|, \quad (8)$$

$$Q_T = \frac{1}{N} \sum_i |\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{n}_i|, \quad (9)$$

где N — полное число частиц внутри круглой области, $\hat{\mathbf{r}}_i$ и $\mathbf{n}_i$ — единичные векторы, параллельные и перпендикулярные радиус-вектору $\mathbf{r}_i$ i -й частицы. Кроме того, для определения степени сегрегации частиц нематиков разного вида (активный нехиральный, активный хиральный, пассивный) нами вводился параметр сегрегации S , который определялся следующим образом. Двумерная область, со-

держащая смесь различных частиц, разбивалась на N_1 достаточно небольших подобластей и для каждой k -й области вычислялся параметр

$$S_k = |n_{k1} - n_{k2}| / (n_{k1} + n_{k2}), \quad (10)$$

где n_{k1} и n_{k2} — числа частиц соответственно первого и второго вида в этой k -й области. Тогда параметр сегрегации S для всей системы определяется как

$$S = \frac{1}{N_1} \sum_k S_k, \quad (11)$$

где суммирование ведется по всем N_1 подобластям.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ MD-МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Нами было проведено MD-моделирование системы, состоящей из 1820 частиц, заключенных внутри двумерной круглой области радиусом 24σ . Из них половина частиц были частицами вида 1, а другая половина — частицами вида 2. Граничные условия в такой системе задавались с помощью «призрачных» (ghost) частиц, образующих слой толщиной 2σ на границе рассматриваемой круглой области. Эти частицы считались неподвижными и ориентированными так, что их единичные векторы $\mathbf{e}$ были направлены вдоль радиуса, проведенного из центра круглой области в точку расположения данной призрачной частицы.

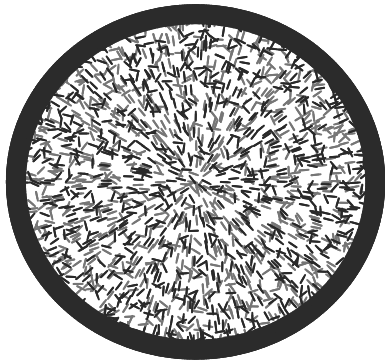


Рис. 2. (В цвете онлайн) Начальная конфигурация для MD-моделирования поведения бинарных смесей внутри двумерной круглой области. Красные и синие черточки — частицы вида 1 и 2 соответственно, коричневая кольцеобразная область содержит призрачные (ghost) частицы

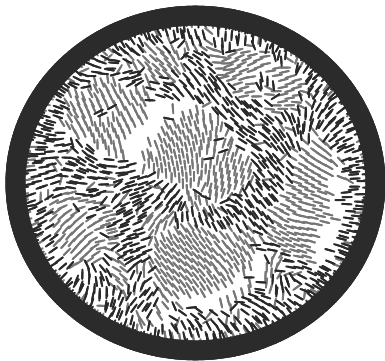


Рис. 3. (В цвете онлайн) Конфигурация бинарной смеси, содержащей 50% активных частиц с $f_0 = 10$, $\phi = \pi/2$ и 50% пассивных частиц с $f_0 = 0$, при граничных условиях с нормальным сцеплением при $t = 100$ (значения приведены в безразмерных MD-единицах [22])

Мы рассматривали два типа граничных условий, соответствующих сильному тангенциальному и нормальному сцеплениям на ограничивающей поверхности. В первом случае призрачные частицы индуцируют ориентацию частиц нематика вдоль касательной к границе, а во втором случае — вдоль радиуса, проведенного в заданную точку. Для обеспечения сильного тангенциального сцепления константа взаимодействия ϵ_2 между частицами нематика и границей двумерной круглой области (т.е. призрачными частицами) считалась равной -5ϵ , а для сильного нормального сцепления мы брали $\epsilon_2 = 5\epsilon$. Мы также считали, что ϵ , σ_2 , m , I и δ просто равны единице в безразмерных MD-единицах [22]. Во всех случаях моделирование стартвало из начальной конфигурации (рис. 2), в которой частицы хаотично располагались внутри круглой области и имели произвольные ориентации своих длинных осей.



Рис. 4. (В цвете онлайн) Такая же конфигурация бинарной смеси, как и на рис. 3, но с $f_0 = 30$

Прежде всего нами было проведено MD-моделирование бинарной смеси, состоящей наполовину из активных частиц с отростком C на рис. 1b, направленным под углом $\phi = \pi/2$ к длинной оси частицы, тогда как вторая половина смеси являлась обычным «пассивным» нематиком (сила $f_0 = 0$). На рис. 3 показана конфигурация такой смеси при $f_0 = 10$, при граничных условиях нормального сцепления и при $t = 100$. Видно, что смесь внутри круглой области состоит из небольших кластеров, содержащих в основном частицы либо первого, либо второго вида, однако границы между ними не четкие. Наличие небольших разреженных областей между некоторыми кластерами можно объяснить тем, что плотность частиц в кластерах немного больше средней плотности равномерно распределенных частиц в начальной конфигурации на рис. 2. Разделение на кластеры, состоящие из активных и пассивных частиц, становится более четким при увеличении самодвижущей силы f_0 . Это ясно видно на рис. 4, на котором показана конфигурация такой же смеси и при тех же граничных условиях, но при $f_0 = 30$.

На рис. 5 показаны временные зависимости параметров порядка Q_R и Q_T для упомянутой выше смеси, а рис. 6 показывает временную зависимость соответствующего параметра сегрегации S . На рис. 5 видно, что зависимости Q_R и Q_T стартуют из одного и того же значения $Q_R = Q_T = 0.5$, которое соответствует начальной конфигурации при $t = 0$, изображенной на рис. 2, в которой ориентации как активных, так и пассивных частиц распределены случайным образом. Дальнейший рост параметра Q_R и уменьшение параметра Q_T вызваны граничными условиями с нормальным сцеплением, что делает радиальный ориентационный порядок более предпочтительным.

При вычислении параметра сегрегации S мы разбили круглую область, содержащую нашу бинарную

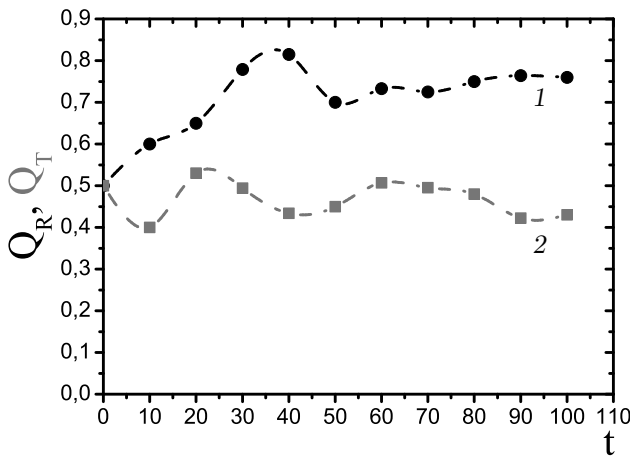


Рис. 5. Временные зависимости параметров Q_R (1) и Q_T (2), начиная с момента $t = 0$, который соответствует начальной конфигурации на рис. 2, и кончая моментом $t = 100$, соответствующим конфигурации на рис. 4

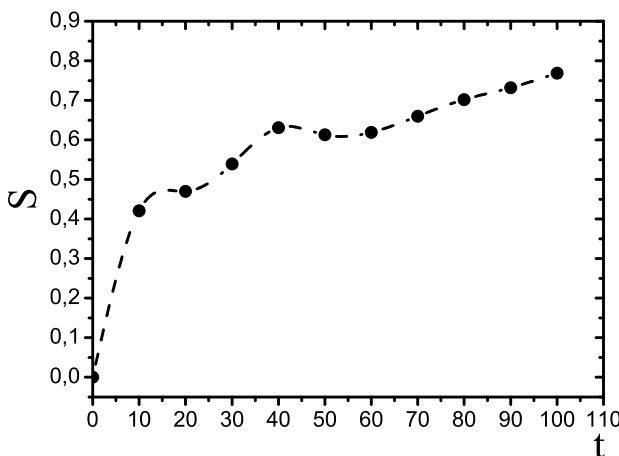


Рис. 6. Временная зависимость параметра S для бинарной смеси, содержащей 50% активных частиц с $f_0 = 30$, $\phi = \pi/2$ и 50% пассивных частиц с $f_0 = 0$, при граничных условиях с нормальным сцеплением

смесь, на 10 колец равной толщины, а затем разбили каждое кольцо на 24 одинаковых сектора, получив, таким образом, 240 достаточно малых подобластей. После этого проводилась процедура определения параметра S , описанная в разд. 2. Ее результат, отраженный на рис. 6, говорит о постепенном росте параметра сегрегации от нуля, что соответствует начальной конфигурации со случайным распределением активных и пассивных частиц внутри круглой области, до довольно большой величины $S \approx 0.75$, соответствующей конфигурации с кластерами на рис. 4. При дальнейшем моделировании ($t > 100$) параметр сегрегации практически не растет, что говорит о достижении насыщения.

На рис. 7 показана конфигурация нашей смеси при $t = 100$ при граничных условиях с тангенци-



Рис. 7. (В цвете онлайн) Конфигурация бинарной смеси при $t = 100$ при граничных условиях с тангенциальным сцеплением. $f_0 = 30$

альным сцеплением при $f_0 = 30$. Эта конфигурация также содержит кластеры активных и пассивных частиц, похожие на кластеры на рис. 4. Зависимость параметров порядка Q_R и Q_T при таких граничных условиях аналогична зависимости этих параметров на рис. 5, но на ней эти параметры как бы меняются местами, т. е. величина Q_T растет, а Q_R уменьшается. Это также вызвано граничными условиями с тангенциальным сцеплением, делающими тангенциальный ориентационный порядок более предпочтительным.

Что касается параметра сегрегации S , то его временная зависимость при тангенциальном сцеплении аналогична временной зависимости на рис. 6, а его величина при $t = 100$ тоже примерно равна 0.75. Эти результаты говорят о том, что при достаточно большой величине самодвижущей силы $f_0 = 30$ имеет место довольно четкое разделение бинарной смеси на кластеры активных и пассивных частиц, слабо зависящее от граничных условий.

Также было проведено MD-моделирование поведения бинарных смесей активных частиц с различной хиральностью при граничных условиях с нормальным и тангенциальным сцеплениями. В частности, на рис. 8 показана конфигурация бинарной смеси, содержащей 50% активных частиц с $f_0 = 30$ и $\phi = \pi/2$ и 50% активных частиц с $f_0 = 30$, но с отсутствием хиральности ($\phi = 0$), при граничных условиях с нормальным сцеплением при $t = 100$. На рис. 8 видно, что эта бинарная смесь разбивается на два больших кластера, один из которых состоит из нормально ориентированных активных частиц с нулевой хиральностью и образует кольцообразную область вблизи ограничивающей поверхности. Второго большой кластер состоит из активных частиц с углом $\phi = \pi/2$ и примыкает к правой половине клас-

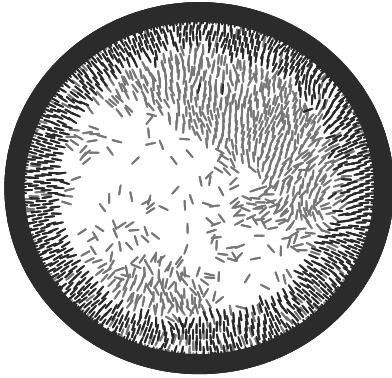


Рис. 8. (В цвете онлайн) Конфигурация бинарной смеси, содержащей 50% активных частиц с $f_0 = 30$, $\phi = \pi/2$ и 50% активных частиц с $f_0 = 30$, но с отсутствием хиральности ($\phi = 0$) при граничных условиях с нормальным сцеплением при $t = 100$



Рис. 10. (В цвете онлайн) Конфигурация такой же бинарной смеси, как и на рис. 8, но при граничных условиях с тангенциальным сцеплением $t = 100$

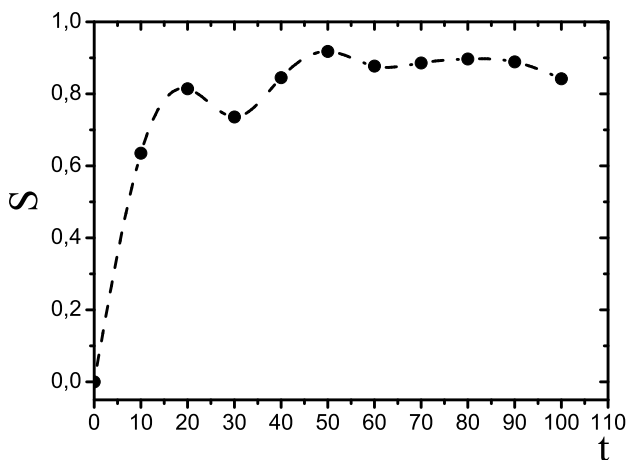


Рис. 9. Временная зависимость параметра S для бинарной смеси активных частиц с различной хиральностью (50% $f_0 = 30$, $\phi = \pi/2$ и 50% $f_0 = 30$, $\phi = 0$) при граничных условиях с нормальным сцеплением

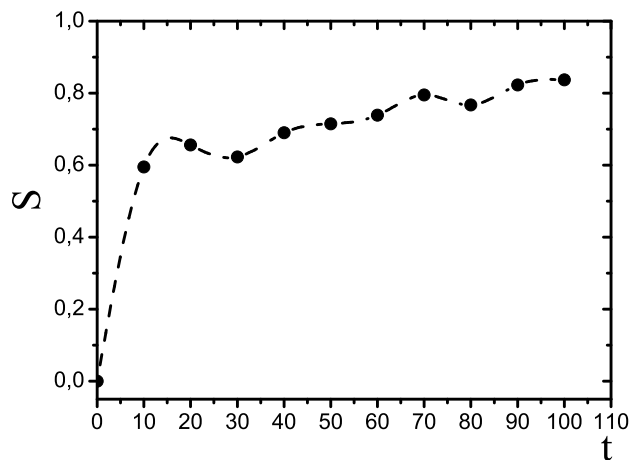


Рис. 11. Временная зависимость параметра S для бинарной смеси активных частиц с различной хиральностью (50% $f_0 = 30$, $\phi = \pi/2$ и 50% $f_0 = 30$, $\phi = 0$) при граничных условиях с тангенциальным сцеплением

тера, состоящего из активных частиц с нулевой хиральностью. Также имеют место небольшой кластер активных хиральных частиц, примыкающий к левой половине кольцеобразного кластера активных нехиральных частиц, и разреженная область с активными хиральными частицами. Описанная выше процедура определения параметра сегрегации S дает его временную зависимость, представленную на рис. 9. Видно, что при $t = 0$ (начальная конфигурация на рис. 2) параметр S равен нулю, а при $t = 100$ (конфигурация на рис. 8) он достигает довольно большой величины $S \approx 0.9$.

На рис. 10 показана конфигурация аналогичной бинарной смеси, но при граничных условиях с тангенциальным сцеплением. Видно, что активные хиральные частицы ($\phi = \pi/2$) с тангенциальной ори-

ентацией в этом случае образуют кольцеобразный кластер вблизи ограничивающей поверхности, а активные нехиральные частицы ($\phi = 0$) образуют большой кластер, примыкающий к левой части этой кольцеобразной области, а также разреженную область с малой концентрацией частиц. Соответствующая временная зависимость параметра сегрегации приведена на рис. 11. Эта зависимость очень похожа на аналогичную зависимость на рис. 9 для случая такой же бинарной смеси при граничных условиях с нормальным сцеплением. Обе зависимости при $t = 100$ имеют значение параметра сегрегации $S = 0.8-0.9$. Это говорит о том, что в бинарной смеси активных частиц с различной хиральностью, заключенной внутри круглой области, также имеет место разделение на кластеры, состоящие из частиц одного вида, слабо зависящее от граничных условий.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено MD-моделирование поведения бинарных смесей модельных активных и пассивных нематиков, а также активных нематиков с разной хиральностью внутри двумерной круглой области с ограничивающими поверхностями с нормальным и тангенциальным сцеплениями. Эти модельные активные материалы состоят из продолговатых частиц, которые взаимодействуют посредством изотропного потенциала Леннарда-Джонса и анизотропного потенциала типа Майера–Заупе. Такие продолговатые частицы также имеют придатки, испускающие струю некоторого вещества, созданную благодаря некоторой внутренней химической реакции. В случае нехиральных частиц эти придатки расположены на конце продолговатых частиц и направлены вдоль их длинных осей. У хиральных частиц придатки расположены сбоку и образуют некоторый угол ϕ с длинными осями. В результате в случае нехиральных частиц испускаемая струя создает дополнительную реактивную самодвижущую силу $\mathbf{f}_0$, направленную вдоль длинных осей частиц, а на хиральные частицы действует не только реактивная самодвижущая сила, но и дополнительный момент $\boldsymbol{\tau}_0$, который вызывает самовращение частиц относительно их геометрических центров. Для пассивных нематиков самодвижущая сила $\mathbf{f}_0$ и дополнительный момент $\boldsymbol{\tau}_0$ равны нулю. Найдено, что бинарная смесь активных и пассивных нематиков, заключенная внутри круглой области, независимо от граничных условий разбивается на отдельные кластеры, состоящие в основном из частиц одного вида, причем, чем больше самодвижущая сила $\mathbf{f}_0$, тем отчетливее выглядит такая кластерная структура. Такое же разбиение на кластеры имеет место в смесях активных нематиков с разной хиральностью. Для каждой бинарной смеси вычислен параметр сегрегации S для ее частиц и показано, что величина этого параметра может достигать довольно большого значения $S = 0.8\text{--}0.9$.

ЛИТЕРАТУРА

1. C. Bechinger, R. Di Leonardo, H. Lowen, C. Reichhardt, and G. Volpe, *Rev. Mod. Phys.* **88**, 045006 (2016).
2. A. Doostmohammadi, J. Ignes-Mullo, J. Yeomans, and F. Sagues, *Nat. Commun.* **9**, 3246 (2018).
3. M. Norton, A. Baskaran, A. Opathalage, B. Langeslay, S. Fraden, A. Baskaran, and F. Hagan, *Phys. Rev. E* **97**, 012702 (2018).
4. A. Maitra and M. Lenz, *Nat. Commun.* **10**, 920 (2019).
5. M. Norton, P. Grover, M. Hagan, and S. Fraden, *Phys. Rev. Lett.* **125**, 178005 (2020).
6. H. Wioland, F. G. Woodhouse, J. Dunkel, J. O. Kessler, and R. E. Goldstein, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 268102 (2013).
7. H. Wioland, E. Lushi, and R. E. Goldstein, *New J. Phys.* **18**, 075002 (2016).
8. M. Ravnik and J. M. Yeomans, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 026001 (2013).
9. A. Doostmohammadi and J. M. Yeomans, *Eur. Phys. J. Spec. Top.* **227**, 2401 (2019).
10. S. Rana, M. Samsuzzaman, and A. Saha, *Soft Matter* **15**, 8865 (2019).
11. S. Das and R. Chelakkot, *Soft Matter* **16**, 7250 (2020).
12. S. Das, S. Ghosh, and R. Chelakkot, *Phys. Rev. E* **102**, 032619 (2020).
13. S. Das, A. Garg, A. I. Campbell, J. Howse, A. Sen, D. Velegol, R. Golestanian, and S. J. Ebbens, *Nat. Commun.* **6**, 8999 (2015).
14. T. Ostapenko, F. J. Schwarzendahl, T. J. Boddeker, C. T. Kreis, J. M. Cammann, G. Mazza, and O. Baumchen, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 068002 (2018).
15. M. Popescu, S. Dietrich, and G. Oshanin, *J. Chem. Phys.* **130**, 94702 (2009).
16. X. Yang, M. L. Manning, and M. C. Marchetti, *Soft Matter* **10**, 6477 (2014).
17. L. V. Mirantsev, *Eur. Phys. J. E* **44**, 112 (2021).
18. E. J. L. de Oliveira, L. V. Mirantsev, M. L. Lyra, and I. N. de Oliveira, *J. Mol. Liq.* **377**, 121513 (2023).
19. A. K. Abramyan, N. M. Bessonov, L. V. Mirantsev, and N. A. Reinberg, *Phys. Lett. A* **379**, 1274 (2015).
20. A. K. Abramyan, N. M. Bessonov, L. V. Mirantsev, and A. A. Chevrychkina, *Eur. Phys. J. B* **91**, 48 (2018).
21. L. V. Mirantsev, *Phys. Rev. E* **100**, 023106 (2019).
22. M. P. Allen and J. Tildesley, *Computer Simulations of Liquids*, Clarendon Press, Oxford (1989).

ЭЛЕКТРОДИНАМИКА ПЛАЗМЕННОГО СОЛЕНОИДА И ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ИНДУКТИВНОГО РАЗРЯДА

И. Н. Карташов^{*}, М. В. Кузелев^{**}

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

Поступила в редакцию 20 ноября 2023 г.,
после переработки 17 января 2024 г.
Принята к публикации 18 января 2024 г.

Исследованы электродинамические свойства плазменного соленоида с холодной столкновительной магнитоактивной плазмой и динамика возбуждения волн азимутальным током на его поверхности при произвольных соотношениях между частотой внешнего источника тока, электронной циклотронной частотой и плазменной частотой. Рассмотрены случаи безграничного и продольно ограниченного плазменных соленоидов. Вычислены их комплексные импедансы и эффективные сопротивления как величины, характеризующие поглощаемую в плазме мощность источника. Показано, что несмотря на ограниченность понятия комплексного импеданса квазистационарным случаем, вещественная его часть совпадает с эффективным сопротивлением даже за пределами условия квазистационарности. Резонансные зависимости вычисленных комплексных импедансов и эффективных сопротивлений плазмы свидетельствуют о том, что при наличии внешнего магнитного поля, в плазменном соленоиде возможно резонансное возбуждение азимутальным током электромагнитных волн со значительной продольной составляющей напряженности электрического поля в области частот меньших циклотронной и плазменной.

DOI: 10.31857/S0044451024050122

1. ВВЕДЕНИЕ

В течение нескольких десятилетий в научной литературе активно обсуждаются индуктивные высокочастотные разряды и источники плазмы на их основе (см. обзоры [1–4]). В отличие от традиционных емкостного и индуктивного высокочастотных разрядов без внешнего магнитного поля его наличие приводит к существенному изменению электромагнитных свойств плазмы в разряде. В частности, появляется возможность возбуждения проникающих в плазму волн низкочастотной части спектра с частотами меньше электронной циклотронной. Источники плазмы, основанные на индуктивном высокочастотном разряде во внешнем магнитном поле имеют существенно меньшие ограничения по плотности плазмы, связанные с достижением ею критического значения для данной частоты генератора, то

есть являются источниками плотной плазмы. Реальные концентрации электронов достигают значений вплоть до 10^{13} см^{-3} [1].

Уникальные характеристики определяют и широкие практические применения высокочастотных индуктивных источников плазмы во внешнем магнитном поле. Одним из важнейших их приложений является использование в качестве ионных двигателей космических аппаратов. В таких источниках плазма создается в результате вложения высокочастотной мощности с последующим электростатическим ускорением ионов. В качестве ионных двигателей рассматриваются источники плазмы различных размеров (диаметры 0.5 – 74 см) [5], в том числе малых (диаметр вакуумной камеры порядка нескольких сантиметров) [6, 7] и сверхмалых (диаметры 0.2 – 2 см) [8]. Внешнее магнитное поле создается как при помощи традиционного соленоида, так и при помощи системы постоянных магнитов. В частности, в [6, 7] для упрощения и миниатюризации конструкции магнитное поле создается постоянным кольцевым магнитом. Еще одним из приложений высокочастотных индуктивных источников плазмы

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

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

является их использование в микроэлектронике для плазменного нанесения покрытий и травления материалов [9]. Помимо этого, поглощение электромагнитных волн с частотами до электронной циклотронной имеет существенное значение как один из методов нагрева плазмы в установках управляемого термоядерного синтеза, в частности, в проектах ITER и DEMO [10, 11]. Поглощение волн в горячей термоядерной плазме осуществляется в основном за счет бесстолкновительного затухания Ландау. При этом параметры плазмы и внешнего удерживающего магнитного поля отличаются от параметров традиционного высокочастотного разряда существенным образом. При концентрации электронов порядка 10^{14} см^{-3} и индукции магнитного поля в токамаке 5 Тл электронные ленгмюровская и циклотронная частоты имеют один порядок и составляют $(5 \dots 10) \times 10^{11} \text{ рад/с}$, что соответствует СВЧ области. Это обстоятельство делает актуальным продвижение существующих теорий индуктивных высокочастотных разрядов в более коротковолновую область — вплоть до СВЧ диапазона.

В случае частоты генератора, значительно меньшей электронной циклотронной частоты, при вложении мощности в плотную плазму говорят о геликонных разрядах. Исследование геликонных разрядов и источников плазмы на их основе началось с работ Босвелла [12, 13]. В первой из этих работ показано, что в трубке, помещенной во внешнее магнитное поле величиной до 1.5 кГс, зажигался разряд на частоте 8 МГц и источником вложения мощности в плазму была возбуждаемая стоячая волна геликонного типа. При теоретическом описании геликонного разряда было указано на возможность существования двух радиальных распространяющихся мод, одна из которых связывается с геликоном, а другая в настоящее время обычно называется модой Трайвелписа-Гоулда или косой ленгмюровской волной [14–17]. В работе [18] рассматривались механизмы вложения в безграничную магнитоактивную плазму высокочастотной мощности при реализации, в зависимости от параметров разряда, предельных случаев возбуждаемой волны с законами дисперсии, соответствующими геликонной волне и косой ленгмюровской волне (моды Трайвелписа–Гоулда). В настоящей работе исследуются электромагнитные свойства индуктивного разряда конечной длины во внешнем магнитном поле при различных соотношениях между частотой возбуждающего генератора, электронной циклотронной частотой и плазменной частотой, что позволяет описать электродинамику плазменного соленоида не только в традиционной

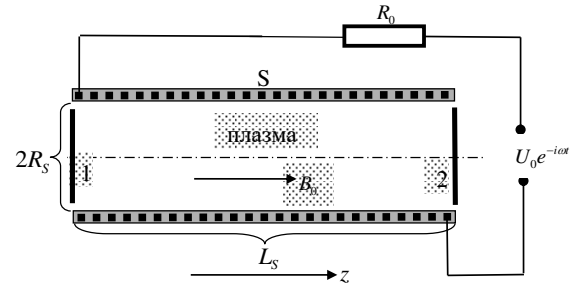


Рис. 1. Плазменный соленоид

области высокочастотного диапазона частот, но и для систем с использованием СВЧ полей [19–23].

Типичные источники плазмы представляют собой вакуумную камеру с давлением газа единицы и десятки миллитор, имеющую диаметр от нескольких миллиметров до десятков сантиметров и протяженность до значений более метра. Разряд поддерживается системой токов, текущих по антенне, которая может иметь различные конфигурации. Мы в настоящей работе будем ориентироваться на параметры разряда в работах [24–26].

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Рассмотрим соленоид S , полностью заполненный однородной плазмой (рис. 1). Соленоид (катушка индуктивности) представляет собой участок цилиндра с радиусом R_S , длиной L_S с тонкой проволочной обмоткой, содержащей N_S витков. Обмотка соленоида через сопротивление R_0 подключена к источнику частоты ω . Имеется также однородное внешнее магнитное поле B_0 , направленное вдоль оси соленоида (ось z). Торцы соленоида могут быть закрыты проводящими заглушками «1» и «2». Описанная система представляет упрощенную схему индуктивного газового разряда [27].

Введем цилиндрические координаты r, φ, z и будем рассматривать только азимутально симметричные распределения электромагнитного поля в соленоиде ($\partial/\partial\varphi = 0$). Предположим, что тензор диэлектрической проницаемости плазмы в цилиндрической системе координат имеет вид ($i, j = r, \varphi, z$)

$$\varepsilon_{ij}(\omega) = \begin{pmatrix} \varepsilon_{rr}(\omega) & \varepsilon_{r\varphi}(\omega) & 0 \\ \varepsilon_{\varphi r}(\omega) & \varepsilon_{\varphi\varphi}(\omega) & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz}(\omega) \end{pmatrix}. \quad (1)$$

В простейшей модели холодной электронной магнитоактивной плазмы со столкновениями компоненты

тензора (1) определяются формулами [28]

$$\begin{aligned}\varepsilon_{rr}(\omega) &= \varepsilon_{\varphi\varphi}(\omega) = \varepsilon_{\perp}(\omega) = 1 - \frac{\omega_{Le}^2(\omega + i\nu_e)}{\omega[(\omega + i\nu_e)^2 - \Omega_e^2]}, \\ \varepsilon_{r\varphi}(\omega) &= -\varepsilon_{\varphi r}(\omega) = ig(\omega) = -i\frac{\omega_{Le}^2\Omega_e}{\omega[(\omega + i\nu_e)^2 - \Omega_e^2]}, \\ \varepsilon_{zz}(\omega) &= \varepsilon_{||}(\omega) = 1 - \frac{\omega_{Le}^2}{\omega(\omega + i\nu_e)}.\end{aligned}\quad (2)$$

Здесь ω_{Le} — электронная ленгмюровская частота, ν_e — эффективная частота столкновений электронов, Ω_e — электронная циклотронная частота.

Для плазмы с тензором диэлектрической проницаемости (1) в случае азимутально симметричных монохроматических возмущений частоты ω после перехода к комплексным амплитудам система уравнений Максвелла записывается в виде

$$\begin{aligned}\frac{\partial E_{\varphi}}{\partial z} &= -i\frac{\omega}{c}B_r, \\ \frac{\partial E_r}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial r} &= i\frac{\omega}{c}B_{\varphi}, \\ \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rE_{\varphi}) &= i\frac{\omega}{c}B_z, \\ \frac{\partial B_{\varphi}}{\partial z} &= i\frac{\omega}{c}\varepsilon_{rr}(\omega)E_r + i\frac{\omega}{c}\varepsilon_{r\varphi}(\omega)E_{\varphi} - \\ &\quad - \frac{4\pi}{c}j_{0r}(z, r), \\ \frac{\partial B_r}{\partial z} - \frac{\partial B_z}{\partial r} &= -i\frac{\omega}{c}\varepsilon_{\varphi r}(\omega)E_r - i\frac{\omega}{c}\varepsilon_{\varphi\varphi}(\omega)E_{\varphi} + \\ &\quad + \frac{4\pi}{c}j_{0\varphi}(z, r), \\ \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rB_{\varphi}) &= -i\frac{\omega}{c}\varepsilon_{zz}(\omega)E_z + \frac{4\pi}{c}j_{0z}(z, r), \\ \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\varepsilon_{rr}E_r) &+ \frac{\partial}{\partial z}(\varepsilon_{zz}E_z) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\varepsilon_{r\varphi}E_{\varphi}) = \\ &= 4\pi\rho_0(z, r).\end{aligned}\quad (3)$$

Здесь $\mathbf{j}_0(z, r) = \{j_{0r}, j_{0\varphi}, j_{0z}\}$ и $\rho_0(z, r)$ — комплексные амплитуды плотности тока и плотности заряда внешних источников поля в плазме. В нашем случае внешним источником является обмотка соленоида, по которой протекает ток от источника, а плотность заряда $\rho_0(z, r)$ равна нулю. Однако, если бы заглушки «1» и «2» были подключены к какому-то источнику, то плотность заряда $\rho_0(z, r)$ была бы обусловлена поверхностными зарядами на этих заглушках, как на обкладках конденсатора. При этом речь бы шла о комбинированном газовом разряде — индуктивно-емкостном. Мы ограничимся только случаем $\rho_0(z, r) = 0$. Резонансные свойства емкостного разряда в поперечном магнитном поле рассмотрены в [29]. Поскольку ток в соленоиде преимущественно является азимутальным, будем полагать, что $j_{0r} = j_{0z} \equiv 0$.

Исключая величины B_z, B_r, B_{φ} и учитывая формулы (2), получаем из (3) следующие уравнения для

комплексных амплитуд компонент вектора напряженности электрического поля E_z, E_r, E_{φ} :

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial E_r}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial r}\right) &+ \frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon_{\perp}E_r + i\frac{\omega^2}{c^2}gE_{\varphi} = 0, \\ \frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}rE_{\varphi}\right) &+ \frac{\partial^2 E_{\varphi}}{\partial z^2} + \frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon_{\perp}E_{\varphi} - i\frac{\omega^2}{c^2}gE_r = \\ &= -i\frac{\omega}{c}\frac{4\pi}{c}j_{0\varphi}(z, r), \\ \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\left(\frac{\partial E_z}{\partial r} - \frac{\partial E_r}{\partial z}\right) &+ \frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon_{||}E_z = 0.\end{aligned}\quad (4)$$

Обсудим теперь граничные условия для уравнений (4). Предположим, что обмотка соленоида локализована на цилиндрической поверхности $r = R_S$, т.е. ток соленоида является поверхностным током. В этом случае плотность тока внешнего источника можно определить при помощи дельта-функции

$$j_{0\varphi}(z, r) = J(z)\delta(r - R_S), \quad 0 < z < L_S, \quad (5)$$

где $J(z)$ — некоторая функция только продольной координаты z . Возьмем второе уравнение системы (4), подставим в него функцию (5) и проинтегрируем уравнение по r в пределах от $R_S - h$ до $R_S + h$ ($h \rightarrow +0$). В результате получим соотношение

$$\frac{\partial E_{\varphi}}{\partial r}(R_S + 0) - \frac{\partial E_{\varphi}}{\partial r}(R_S - 0) = -i\frac{\omega}{c}\frac{4\pi}{c}J(z). \quad (6)$$

Как видно из третьего и пятого уравнений системы (3), соотношение (6) обусловлено скачком тангенциальной составляющей индукции магнитного поля $B_z(r)$ на поверхности с током (5). Кроме (6) понадобятся еще и условия непрерывности тангенциальных составляющих напряженности электрического поля

$$\begin{aligned}E_z(R_S + 0) - E_z(R_S - 0) &= 0, \\ E_{\varphi}(R_S + 0) - E_{\varphi}(R_S - 0) &= 0.\end{aligned}\quad (7)$$

Соотношения (6) и (7) составляют основные граничные условия для однородных уравнений (4)¹⁾. Граничные условия по переменной z будут обсуждаться в дальнейшем по ходу изложения.

Одним из сложных моментов является определение функции $J(z)$. Сложности нет только в квазистационарном приближении, в рамках которого полагается, что мгновенные значения силы тока в каждой точке электрической цепи, в том числе и в каж-

¹⁾ Внутри соленоида при $r < R_S$ и вне соленоида при $r > R_S$ правая часть второго уравнения системы (4) согласно (5) равна нулю.

дом витке обмотки соленоида, одинаковы. Считая, что это так, можем записать

$$\int_0^{L_S} dz \int_{R_S-h}^{R_S+h} dr j_{0\varphi}(z, r) = N_S I. \quad (8)$$

Здесь I — сила тока в цепи, а $2h$ — толщина обмотки соленоида, т.е. интегрирование в (8) производится по продольному сечению обмотки соленоида. В модели соленоида с поверхностным током (5) предполагается, что $h \rightarrow +0$. Подставляя (5) в (8), имеем

$$I = \frac{1}{N_S} \int_0^{L_S} J(z) dz. \quad (9)$$

Если плотность числа витков обмотки соленоида постоянна и число витков достаточно велико, то функция $J(z)$ может быть представлена в виде

$$J(z) = \frac{N_S I}{L_S} = \text{const}. \quad (10)$$

На практике распространена ситуация, когда плотность числа витков соленоида непостоянна²⁾. В этом случае функция $J(z)$ считается известной, например, из условий эксперимента. В любом случае такая функция должна удовлетворять условию нормировки (9).

Условия применимости формулы (8)

$$\frac{\omega}{c} R_S, \frac{\omega}{c} L_S \ll 1 \quad (11)$$

означают, что длина электромагнитной волны частоты ω велика по сравнению с размерами соленоида³⁾. В этих условиях плазменный соленоид, какие бы сложные электромагнитные процессы ни происходили в плазме, для электрической цепи играет роль сосредоточенного элемента, как обыкновенные катушка индуктивности, или конденсатор. Поэтому, в квазистационарном приближении для электрической цепи плазменный соленоид характеризуется одним единственным параметром — комплексным импедансом Z_S .

Для вычисления импеданса Z_S учтем, что в цепи с соленоидом действует э.д.с. индукции $\mathcal{E}_S$, «подключенная» в цепь последовательно с внешним источником. Поэтому закон Ома для полной цепи,

²⁾ В реальных экспериментах по индуктивному газовому разряду часто используются соленоиды весьма сложной формы. Поэтому их даже называют не соленоидами, а антеннами [1, 3].

³⁾ Условие квазистационарности электрической цепи имеет вид (11) с заменой размеров соленоида на размер всей цепи в целом.

изображенной на рис. 1, для комплексных амплитуд имеет вид $U_0 + \mathcal{E}_S = IR_0$. Сама же э.д.с. индукции по определению равна интегралу вдоль обмотки соленоида от компоненты напряженности электрического поля $E_\varphi(z, r)$. Учитывая, что длина обмотки соленоида равна $2\pi R_S N_S$, и вводя среднее по длине соленоида значение азимутальной составляющей напряженности электрического поля

$$\langle E_\varphi(z, R_S) \rangle = \frac{1}{L_S} \int_0^{L_S} E_\varphi(z, R_S) dz, \quad (12)$$

представим э.д.с. индукции в виде

$$\mathcal{E}_S = 2\pi R_S N_S \langle E_\varphi(z, R_S) \rangle. \quad (13)$$

Подставляя выражение (13) в закон Ома, запишем следующее соотношение:

$$U_0 = IR_0 - 2\pi R_S N_S \langle E_\varphi(z, R_S) \rangle, \quad (14)$$

которое при необходимости можно использовать в качестве дополнительного условия для уравнений (4). Соотношения типа (14) известны в литературе как уравнения внешней цепи [30].

Чтобы получить формулу для импеданса плазменного соленоида учтем, что напряжение внешнего источника распределяется на падение напряжения на сопротивлении R_0 и на падение напряжения на плазменном соленоиде, т.е. $U_0 = IR_0 + IZ_S$. Сравнивая последнее соотношение с выражением (14), для импеданса имеем

$$Z_S = -2\pi R_S N_S \langle E_\varphi(z, R_S) \rangle / I. \quad (15)$$

В силу граничного условия (6) и формулы (9) напряженность электрического поля в соленоиде пропорциональна току в цепи. Следовательно, величина (15) не зависит от тока, а определяется только соленоидом — его геометрией и параметрами плазмы. Используя общее соотношение $Z_S = -i\omega \Lambda_S$ можно вычислить и комплексную индуктивность плазменного соленоида Λ_S .

С помощью импеданса могут быть исследованы резонансные свойства плазменного соленоида и рассмотрен вопрос о выделении в плазме соленоида мощности внешнего источника, что для физики газоразрядных процессов имеет первостепенное значение. Для простейшей последовательной цепи (источник напряжения U_0 через активное сопротивление R_0 подключен к обмотке плазменного соленоида, рис. 1) мощность внешнего источника, выделяемая в плазме, определяется формулой [31]

$$W = \frac{1}{2} |U_0|^2 \frac{Z'_S}{(R_0 + Z'_S)^2 + (Z''_S)^2}, \quad (16)$$

где $Z_S = Z'_S + iZ''_S$ ⁴⁾. Как функция комплексной переменной ω , комплексный импеданс $Z_S(\omega)$ имеет полюса, в окрестности которых

$$Z_S = iA(\omega - \omega^{(\infty)})^{-1}, \quad (17)$$

и нули, вблизи которых

$$Z_S = iB(\omega - \omega^{(0)}), \quad (18)$$

где A и B — постоянные, а $\omega^{(\infty)}$ и $\omega^{(0)}$ — некоторые комплексные частоты [31]. В случае большого активного сопротивления цепи, $R_0 \gg |Z_S|$, мощность выделяемая в плазме дается формулой

$$W = \frac{|U_0|^2}{2R_0^2} Z'_S. \quad (19)$$

Как функция частоты ω величина (19) максимальна в максимумах действительной части импеданса, т.е. в точках $\omega = \text{Re}\omega^{(\infty)}$. Известно, что при $\omega = \omega^{(\infty)}$ в цепи имеет место резонанс токов: импеданс максимален, а ток в цепи минимален. При малом сопротивлении R_0 для мощности (16) имеем

$$W = \frac{1}{2}|U_0|^2 \frac{Z'_S}{(Z'_S)^2 + (Z''_S)^2}. \quad (20)$$

Мощность (20) максимальна в нулях мнимой части импеданса $\omega = \text{Re}\omega^{(0)}$, что имеет место при резонансе напряжений — импеданс минимален, а ток в цепи максимален⁵⁾. Заметим, что экспериментальное наблюдение резонансов токов и напряжений в газовых разрядах базируется, в том числе и на формулах (19) и (20).

Область применимости формул (16)-(20), как и область применимости самого понятия импеданса, ограничивается условием квазистационарности электрической цепи [32]. При повышении частоты внешнего источника ω , когда условие квазистационарности нарушается, для вычисления мощности выделяемой в плазме соленоида следует использовать электродинамические методы. Исходим из формулы для плотности мощности $W = \langle \mathbf{j} \cdot \mathbf{E} \rangle$, где $\mathbf{E}$ — вектор напряженности электрического поля, $\mathbf{j}$ — вектор плотности тока, наведенного в плазме, а угловые скобки означают усреднение по периоду $2\pi/\omega$.

⁴⁾ Излагаемые здесь элементарные сведения из электротехники относятся не только к плазменному соленоиду, но и к любому другому элементу электрической цепи.

⁵⁾ Исторически названия резонансы токов и напряжений возникли в связи с исследованием параллельного и последовательного колебательных контуров, состоящих из активного сопротивления, емкости и индуктивности.

Выражая плотность тока через напряженность поля и диэлектрическую проницаемость [33]

$$\mathbf{j}_i = \frac{\omega}{4\pi i} (\varepsilon_{ij} - \delta_{ij}) \mathbf{E}_j, \quad (21)$$

после несложных вычислений для плотности мощности имеем

$$W(z, r) = \frac{\omega}{8\pi} [\varepsilon''_{\perp} (|E_r(z, r)|^2 + |E_{\varphi}(z, r)|^2) + \varepsilon''_{\parallel} |E_z(z, r)|^2 - 2g'' \text{Im}(E_r^*(z, r)E_{\varphi}(z, r))], \quad (22)$$

где индекс «два штриха» означает мнимую часть. Выполняя в (22) интегрирование по z от нуля до L_S и по r с весом $2\pi r$ от нуля до R_S , можно вычислить полную мощность внешнего источника, выделяемую в плазме соленоида $W(\omega)$. В общем случае это удастся осуществить только численно.

Входящие в (22) компоненты напряженности электрического поля вычисляются из однородной системы уравнений (4) с граничными условиями (6) и (7). В связи с этим опять встает вопрос об определении функции $J(z)$, но уже за пределами применимости квазистационарного приближения, когда рассмотрение системы, изображенной на рис. 1 электротехническими методами недопустимо. В этом случае следует решать полную электродинамическую задачу для соленоида, подводящих проводов, источника напряжения и даже части окружающего пространства, что вряд ли выполнимо. Наша цель — получить компактные, физически наглядные и полезные для экспериментальных исследований результаты. Независимо от частоты стационарно подаваемого на антенну соленоида сигнала в ней устанавливается некоторое распределение тока $J(z)$. Задавая его из каких-то разумных физических соображений и определяя из системы (4) компоненты вектора напряженности электрического поля, можно по формуле (22) вычислить энергию, выделяемую в плазме соленоида и главное — исследовать резонансные свойства соленоида с плазменным заполнением, что и будет сделано в дальнейшем. В пределах применимости формулы (9) мощность, выделяемая в плазме $W(\omega)$, может быть представлена в виде $W(\omega) = R_{eff} I^2 / 2$, где R_{eff} — эффективное сопротивление плазмы. В квазистационарной области частот эффективное сопротивление, разумеется, должно совпадать с вещественной частью импеданса.

3. ПЛАЗМЕННЫЙ СОЛЕНОИД БОЛЬШОЙ ДЛИНЫ С ПОСТОЯННОЙ ПЛОТНОСТЬЮ ЧИСЛА ВИТКОВ ОБМОТКИ

Предположим, что выполнено неравенство

$$R_S \ll L_S, \quad (23)$$

т.е. длина соленоида существенно превышает его радиус. В этом случае разумно полагать, что процессы в окрестностях продольных границ соленоида $z = 0, L_S$ (краевые эффекты) мало влияют на происходящее в его объеме. Поэтому можно считать, что продольное распределение электромагнитного поля в соленоиде определяется не условиями на продольных границах, а какими-то другими факторами. В силу линейности уравнений (4) и граничных условий (6) и (7), единственным таким фактором является плотность числа витков обмотки соленоида, т.е. функция $J(z)$. Начнем с простейшего случая постоянной плотности тока (10).

Считая электромагнитное поле в соленоиде независимым от координаты z , в уравнениях (4) полагаем $\partial/\partial z = 0$. При этом третье уравнение системы (4) становится независимым от первых двух уравнений. В результате компонента поля E_z , не входящая также в граничное условие (6), оказывается независимой от компонент E_r и E_φ , а поэтому можно положить $E_z = 0$. Тогда из первых двух уравнений системы (4), после исключения E_r , получается следующее уравнение:

$$\frac{d}{dr} \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} r E_\varphi \right) + \frac{\omega^2}{c^2} \tilde{\varepsilon}_\perp E_\varphi = 0, \quad \tilde{\varepsilon}_\perp = \varepsilon_\perp - \frac{g^2}{\varepsilon_\perp}, \quad (24)$$

справедливое как внутри соленоида ($r < R_S$), так и вне его ($r > R_S$); вне соленоида $\tilde{\varepsilon}_\perp = 1$. Граничные условия для уравнения (24) с учетом (6), (7) и (10) имеют вид

$$\begin{aligned} E_\varphi(R_S + 0) - E_\varphi(R_S - 0) &= 0, \\ \frac{dE_\varphi}{dr}(R_S + 0) - \frac{dE_\varphi}{dr}(R_S - 0) &= -i \frac{\omega}{c} \frac{4\pi}{c} \frac{N_S}{L_S} I. \end{aligned} \quad (25)$$

Кроме того, функция $E_\varphi(r)$ должна быть ограничена в нуле и на бесконечности.

При $r < R_S$ ограниченное решение уравнения (24) имеет вид $E_\varphi(r) = A_1 J_1[(\omega/c)\sqrt{\tilde{\varepsilon}_\perp}r]$, где $J_1(x)$ — функция Бесселя 1-го порядка. В области $r > R_S$ решение нужно взять следующее: $E_\varphi(r) = A_2 H_1^{(1)}[(\omega/c)r]$, где $H_1^{(1)}(x)$ — функция Ганкеля 1-го рода. Записывая решение через функцию Ганкеля 1-го рода, мы использовали принцип причинности (условие излучения [34]), согласно которому при $\omega = \omega + i\delta$ при $\delta \rightarrow +0$, поле должно экспоненциально затухать при $r \rightarrow \infty$ ($\sim \exp(-\delta r/c)$). Подставляя найденные решения в граничные условия (25) и определяя постоянные $A_{1,2}$, находим электрическое поле в объеме соленоида ($r \leq R_S$)

$$E_\varphi(r) = i \frac{4\pi}{c} \frac{N_S}{L_S} I \frac{J_1[(\omega/c)\sqrt{\tilde{\varepsilon}_\perp}r] H_1^{(1)}[(\omega/c)R_S]}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}_\perp} J_0[(\omega/c)\sqrt{\tilde{\varepsilon}_\perp}R_S] H_1^{(1)}[(\omega/c)R_S] - J_1[(\omega/c)\sqrt{\tilde{\varepsilon}_\perp}R_S] H_0^{(1)}[(\omega/c)R_S]}. \quad (26)$$

В квазистационарном приближении, учитывая первое неравенство (11) и асимптотику цилиндрических функций при малом значении аргумента, решение (26) преобразуем к виду

$$E_\varphi(r) = i \frac{4\pi}{c} \frac{N_S}{L_S} I \frac{J_1[(\omega/c)\sqrt{\tilde{\varepsilon}_\perp}r]}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}_\perp} J_0[(\omega/c)\sqrt{\tilde{\varepsilon}_\perp}R_S]}. \quad (27)$$

Решение (27) можно получить и напрямую из уравнения (24). Действительно, в квазистационарном приближении в уравнении (24) в области $r > R_S$ следует отбросить второе слагаемое в левой части. Ограниченное на бесконечности решение получившегося при этом уравнения имеет вид $E_\varphi(r) = A_2/r$. Его подстановка в граничные условия (25) опять приводит к формуле (27). Заметим, что даже в квазистационарном приближении в левой части уравне-

ния (24) мы не отбрасываем второе слагаемое, пропорциональное $\tilde{\varepsilon}_\perp(\omega^2/c^2)R_S^2$. Например, при $\omega \approx \Omega_e$ это слагаемое существенно и в квазистационарном приближении. И вообще, если это слагаемое отбросить, то от плазмы ничего не останется.

Между решениями (26) и (27) имеется важное различие. Решение (26) учитывает вынос электромагнитного излучения из соленоида через его боковую поверхность $r = R_S$. Квазистационарное решение (27) такого излучения естественно не учитывает. Но в области высоких частот $\omega > c/R_S$ излучение из соленоида в общем балансе энергии может играть заметную роль, как некий дополнительный канал расхода энергии внешнего источника. Чтобы исключить излучение через боковую поверхность соленоида, можно предполо-

жить, что соленоид заключен в проводящий цилиндрический кожух радиуса $r = \mathcal{R} > R_S$. Тогда, дополняя краевую задачу (24), (25) условием $E_\varphi(\mathcal{R}) = 0$ и находя ее решение, не сложно получить для $E_\varphi(r)$ выражение, отличающееся от (26) только заменой функций Ганкеля $H_{0,1}^{(1)}[(\omega/c)R_S]$ на функции $X_{0,1}[(\omega/c)R_S] = J_{0,1}[(\omega/c)R_S]N_1[(\omega/c)\mathcal{R}] - N_{0,1}[(\omega/c)R_S]J_1[(\omega/c)\mathcal{R}]$.

Вычислим теперь импеданс рассматриваемого соленоида. Используем для этого результат квазистационарного приближения (27), подставляя кото-

рый в формулу (15), имеем

$$Z_S(\omega) = Z'_S(\omega) + iZ''_S(\omega) = -i\omega\Lambda_0 \frac{2J_1[(\omega/c)\sqrt{\varepsilon_\perp}R_S]}{(\omega/c)\sqrt{\varepsilon_\perp}R_S J_0[(\omega/c)\sqrt{\varepsilon_\perp}R_S]}, \quad (28)$$

где $\Lambda_0 = 4\pi^2 R_S^2 N_S^2 c^{-2} L_S^{-1}$ — индуктивность соленоида без плазменного заполнения. Приведем еще формулу для импеданса плазменного соленоида, заключенного в проводящий кожух

$$Z_S(\omega) = -i\omega\Lambda_0 \frac{2[(\omega/c)R_S]^{-1} J_1[(\omega/c)\sqrt{\varepsilon_\perp}R_S] X_1[(\omega/c)R_S]}{\sqrt{\varepsilon_\perp} J_0[(\omega/c)\sqrt{\varepsilon_\perp}R_S] X_1[(\omega/c)R_S] - J_1[(\omega/c)\sqrt{\varepsilon_\perp}R_S] X_0[(\omega/c)R_S]}. \quad (28a)$$

Индуктивность плазменного соленоида можно определить формулой $\Lambda_S(\omega) = -Z''_S(\omega)/\omega$, а его активное сопротивление равно вещественной части импеданса $Z'_S(\omega)$.

Проанализируем выражение (28) для плазмы с диэлектрической проницаемостью (1), (2). Если столкновения отсутствуют, то активное сопротивление плазменного соленоида равно нулю, а выражение для его индуктивности оказывается следующим:

$$\Lambda_S(\omega) = \Lambda_0 \frac{2J_1(a)}{aJ_0(a)}, \quad a^2 = \frac{(\omega^2 - \omega_{Le}^2)^2 - \omega^2 \Omega_e^2 R_S^2}{\omega^2 - \Omega_g^2} \frac{R_S^2}{c^2}, \quad (29)$$

где $\Omega_g = \sqrt{\omega_{Le}^2 + \Omega_e^2}$ — верхняя гибридная частота. Рассмотрим предельные случаи. В отсутствие плазмы, т.е. при $\omega_{Le} = 0$, с учетом условия квазистационарности (11) для индуктивности (29) имеем, как и должно быть, $\Lambda_S(\omega) = \Lambda_0$. В отсутствие внешнего магнитного поля ($\Omega_e = 0$) формула (29) преобразуется к виду

$$\Lambda_S(\omega) = \Lambda_0 \frac{2J_1(\sqrt{\omega^2 - \omega_{Le}^2} R_S/c)}{(\sqrt{\omega^2 - \omega_{Le}^2} R_S/c) J_0(\sqrt{\omega^2 - \omega_{Le}^2} R_S/c)}. \quad (30)$$

В квазистационарной области частот индуктивность (30) ни нулей, ни полюсов не имеет. При $\omega \rightarrow \omega_{Le}$ индуктивность (30) стремится к индуктивности соленоида без плазменного заполнения Λ_0 . В случае $\omega < \omega_{Le}$ формулу (30) удобно записать следующим образом:

$$\Lambda_S(\omega) = \Lambda_0 \frac{2I_1(\sqrt{\omega_{Le}^2 - \omega^2} R_S/c)}{(\sqrt{\omega_{Le}^2 - \omega^2} R_S/c) I_0(\sqrt{\omega_{Le}^2 - \omega^2} R_S/c)}. \quad (31)$$

Индуктивность (31) меньше, чем Λ_0 , что связано с экранированием низкочастотного поперечного поля в плазме. При $\omega_{Le} R_S/c \gg 1$ и $\omega \ll \omega_{Le}$ (случай плотной плазмы) из (31) имеем $\Lambda_S(\omega) = 2c\Lambda_0/(\omega_{Le} R_S) \ll \Lambda_0$. В пределе сильного внешнего магнитного поля ($\Omega_e \rightarrow \infty$) из (29) имеем $\Lambda_S(\omega) = \Lambda_0$. Последнее понятно: в сильном магнитном поле поперечные движения электронов запрещены, что для азимутального электрического поля эквивалентно отсутствию плазмы. Таким образом, в предельных случаях нулевого и очень сильного внешнего магнитного поля в квазистационарной области частот индуктивность плазменного соленоида каких-либо резонансных особенностей не имеет.

При промежуточных значениях циклотронной и ленгмюровской частот, нули и полюса индуктивности (29) и импеданса (28) могут попадать в низкочастотную (квазистационарную) область. Из формулы (28) следует, что при отсутствии столкновений нули и полюса импеданса плазменного соленоида совпадают с корнями уравнения

$$\frac{(\omega^2 - \omega_{Le}^2)^2 - \omega^2 \Omega_e^2}{\omega^2 - \Omega_g^2} = \mu_n^2 \frac{c^2}{R_S^2}, \quad \mu_n = \begin{cases} \mu_{1n}, \\ \mu_{0n}. \end{cases} \quad (32)$$

При $\mu_n = \mu_{1n}$ ($n = 1, 2, \dots$) из (32) определяются нули $\omega = \omega_n^{(0)}$, а при $\mu_n = \mu_{0n}$ уравнение (32) дает полюса $\omega = \omega_n^{(\infty)}$ импеданса (28). Здесь μ_{1n} — корни уравнения $J_1(x) = 0$, а μ_{0n} — корни уравнения $J_0(x) = 0$. Несложно видеть, что в интересующую нас квазистационарную область частот корни уравнения (32) попадают только при $\Omega_e R_S/c < 1$ и $\omega_{Le} R_S/c < 1$. В противном случае резонансных то-

чек у импеданса (28) в квазистационарной области частот нет.

Используя первое неравенство (11), легко показать, что в интересующей нас области частот и параметров плазмы корни уравнения (32) определяются следующей приближенной формулой:

$$\omega_n^{(0,\infty)} \approx \Omega_g \sqrt{\left(1 + \frac{\Omega_e^2 \Omega_e^2 R_S^2}{\Omega_g^2 c^2 \mu_n^2}\right) \left(1 + \frac{\Omega_e^2 R_S^2}{c^2 \mu_n^2}\right)^{-1}} \leq \Omega_g. \quad (33)$$

При получении (33) использован тот факт, что μ_n^2 являются достаточно большими величинами (не менее $\mu_{01}^2 \approx 5.8$). При $\Omega_e \rightarrow 0$ все корни (33) становятся равными ω_{Le} .

Точки, определяемые формулами (33), расположены достаточно близко друг к другу. Поэтому даже при небольшой диссипации соседние нули $\omega_n^{(0)}$ и полюса $\omega_n^{(\infty)}$ становятся неразличимыми. Резонансное поглощение энергии внешнего источника в плазме все же имеется (несмотря на слияние резонансов), причем на частоте ω , близкой к верхней гибридной частоте Ω_g . То, что резонансное поглощение должно происходить именно вблизи Ω_g видно уже из формулы (33), поскольку для всех больших n имеем $\omega_n^{(0,\infty)} \approx \Omega_g$.

На рис. 2 показаны вещественная (сплошная линия) и мнимая (штриховая линия) части импеданса однородного плазменного соленоида без кожуха в зависимости от частоты внешнего источника при $\omega_{Le} R_S/c = 0.5$, $\Omega_e R_S/c = 0.7$ и $\nu_e = 0.03\omega_{Le}$. Значительное поглощение и возмущение мнимой части импеданса наблюдаются вблизи частот (33), т.е. около Ω_g , что связано с резонансным возбуждением в плазме электромагнитных колебаний B -типа. Штриховая кривая фактически представляет собой индуктивность плазменного соленоида и за исключением узкой области, вблизи частот (33) индуктивность плазменного соленоида близка к вакуумному значению Λ_0 . Заметим, что параметр $\omega R_S/c$ принимает на рис. 2 довольно большие значения, а поэтому рис. 2 находится на грани применимости квазистационарного приближения. Мы привели здесь такой «не вполне надежный» рисунок только для того, чтобы сделать более заметными характерные особенности импеданса и индуктивности плазменного соленоида. При уменьшении параметра $\Omega_g R_S/c$ структура зависимостей, представленных на рис. 2 сохраняется, но особенности кривых становятся менее выраженными. Кроме того, как показывают расчеты, вещественная часть импеданса с хорошей точностью совпадает с эффективным сопротивлением, вычисленным исходя из выражения для объемной

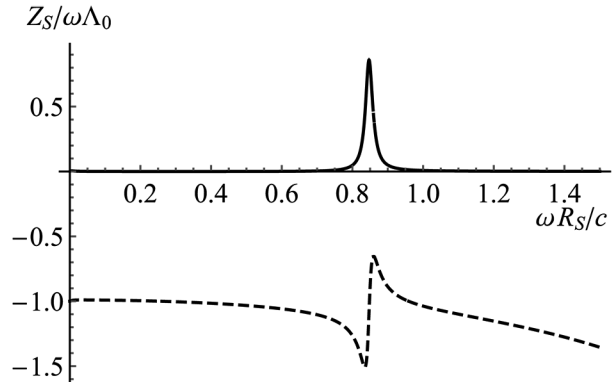


Рис. 2. Комплексный импеданс однородного плазменного соленоида без кожуха: сплошная линия — вещественная часть, штриховая — мнимая часть

плотности энергии (22), и за пределами квазистационарного приближения. Поэтому в дальнейшем для обозначения эффективного сопротивления будем использовать обозначение Z'_S , такое же, как и для вещественной части импеданса.

Согласно «каноническим» формулам (17) и (18) в точке $\omega = \omega^{(\infty)}$ (при резонансе токов) мнимая часть импеданса обращается в ноль, а вещественная часть достигает максимума, а в точке $\omega = \omega^{(0)}$ (при резонансе напряжений) обращается в ноль мнимая часть импеданса. Как видно из рис. 2, мнимая часть импеданса в ноль не обращается вообще. Такое не совсем обычное поведение импеданса в резонансной точке обусловлено слиянием близко расположенных друг к другу полюсов $\omega_n^{(\infty)}$ и нулей $\omega_n^{(0)}$. Поскольку действительная часть импеданса на рис. 2 имеет достаточно резкий максимум, соответствующий резонанс следует однозначно классифицировать как резонанс токов. Заметим, что различие между резонансами токов и напряжений в плазменном соленоиде определяется величиной компоненты поля $E_\varphi(r)$ на обмотке соленоида (см. формулу (27)): когда $E_\varphi(R_S)$ достигает максимального значения, имеет место резонанс токов, а когда $E_\varphi(R_S) \approx 0$ падение напряжения на соленоиде мало и реализуется резонанс напряжений. Расчеты показывают (см. рис. 2 и далее), что для плазменного соленоида резонанс напряжений является нетипичным явлением.

На рис. 3 в зависимости от безразмерной циклотронной частоты $\Omega_e R_S/c$ представлены вещественные части импеданса (28), рассчитанные при различных плазменных частотах $\omega_{Le} R_S/c = 0.1; 0.2; 0.25; 0.285; 0.3$, постоянной частоте источника $\omega R_S/c = 0.3$ и $\nu_e = 0.03\omega_{Le}$. Резонансные циклотронные частоты определяются из уравнений

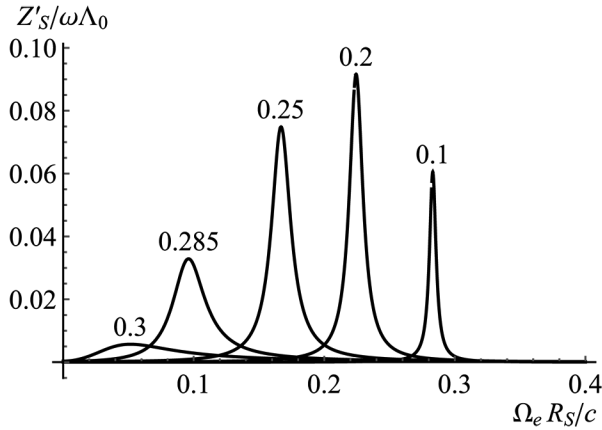


Рис. 3. Вещественная часть импеданса однородного плазменного соленоида. Числа около кривых соответствуют значению $\omega_{Le} R_S/c$

$\omega = \omega_n^{(\infty)}$, решая которые с хорошей точностью имеем $\Omega_e \approx \sqrt{\omega^2 - \omega_{Le}^2}$, что полностью согласуется с рис. 3. При увеличении ω_{Le} резонансы смещаются в область меньших циклотронных частот, а при $\omega_{Le} > \omega$ вообще пропадают. В соответствии с формулой (19) кривые, представленные на рис. 3, определяют в относительных единицах мощности источника, выделяемые в плазменном соленоиде, когда активное сопротивление цепи велико.

При повышении частот Ω_e и ω_{Le} резонансная частота выходит за пределы квазистационарного частотного диапазона. При этом для исследования резонанса в плазменном соленоиде следует использовать формулу (22), которая в рассматриваемом сейчас случае записывается в виде

$$W(r) = \frac{\omega}{8\pi} q |E_\varphi(r)|^2, \quad (34)$$

$$q = \varepsilon'_\perp (1 + |g|^2/|\varepsilon_\perp|^2) - 2g'' \text{Re}(g/\varepsilon_\perp).$$

Здесь было учтено первое уравнение системы (4) при $\partial/\partial z = 0$. Подставляя в (34) поле (26) и выполняя интегрирование по объему соленоида, можно получить выражение для полной мощности внешнего источника, выделяемой в плазме, которое из-за громоздкости мы здесь не приводим, а результат расчета для плазменного соленоида с параметрами $\omega_{Le} R_S/c = 5$, $\Omega_e R_S/c = 7$, $\nu_e = 0.03\omega_{Le}$ представлен на рис. 4а. Как видно, пики эффективного сопротивления оказываются широкими и размытыми. Все это свидетельствует о том, что мощность источника расходуется не на возбуждение собственных волн в плазме, а идет на излучение из соленоида. Это обстоятельство следует принимать во внимание при интерпретации экспериментов по индуктивным раз-

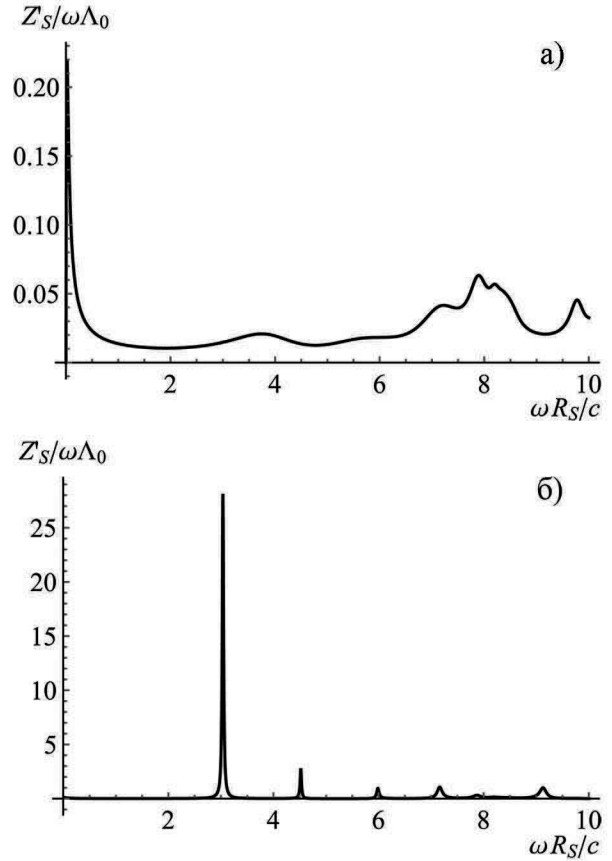


Рис. 4. Эффективное сопротивление однородного плазменного соленоида при учете выноса излучения (а) и при наличии ограничивающего кожуха (б)

рядом в области частот, сопоставимых с величинами c/R_S и c/L_S .

Ранее уже говорилось, что избежать излучения из соленоида можно при помощи экранирующего кожуха, окружающего соленоид. На рис. 4б представлен результат расчета мощности источника для соленоида с кожухом при $R/R_S = 1.6$. Расчет был проведен по формуле (34) с полем (26), в котором функции Ганкеля заменены на функции $X_{0,1}[(\omega/c)R_S]$. Как видим, результат кардинально отличается от представленного на рис. 4а.

4. ОГРАНИЧЕННЫЙ ПЛАЗМЕННЫЙ СОЛЕНОИД БЕЗ ВНЕШНЕГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ

Теория плазменного соленоида существенно усложняется в случае, когда электромагнитное поле в соленоиде зависит от продольной координаты z . Такая зависимость естественным образом возникает в соленоиде с переменной плотностью числа

витков обмотки, если число витков не велико или в ограниченном соленоиде, у которого на границах $z = 0$ и $z = L_S$ расположены проводящие плоскости. Рассмотрим случай ограниченного соленоида. На проводящих плоскостях равны нулю тангенциальные составляющие напряженности электрического поля. Поэтому имеют место следующие граничные условия:

$$E_r|_{z=0} = E_r|_{z=L_S} = 0, \quad E_\varphi|_{z=0} = E_\varphi|_{z=L_S} = 0. \quad (35)$$

Учитывая граничные условия (35), будем искать решение уравнений (4) в виде

$$\begin{aligned} E_r(z, r) &= \sum_{n=1} E_{rn}(r) \sin(k_{zn}z), \\ E_\varphi(z, r) &= \sum_{n=1} E_{\varphi n}(r) \sin(k_{zn}z), \\ E_z(z, r) &= \sum_{n=1} E_{zn}(r) \cos(k_{zn}z), \end{aligned} \quad (36)$$

где $k_{zn} = \pi n/L_S$ — продольные волновые числа, возбуждаемых в соленоиде электромагнитных колебаний. Подстановка разложений (36) в уравнения (4) приводит к следующим уравнениям для функций $E_{rn}(r)$, $E_{\varphi n}(r)$ и $E_{zn}(r)$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} r E_{\varphi n} \right) - k_{zn}^2 E_{\varphi n} + \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_\perp E_{\varphi n} - \\ - i \frac{\omega^2}{c^2} g E_{rn} = 0, \\ k_{zn} \left(k_{zn} E_{rn} - \frac{dE_{zn}}{dr} \right) - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_\perp E_{rn} - \\ - i \frac{\omega^2}{c^2} g E_{\varphi n} = 0, \\ \frac{1}{r} \frac{d}{dr} r \left(\frac{dE_{zn}}{dr} - k_{zn} E_{rn} \right) + \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_{||} E_{zn} = 0. \end{aligned} \quad (37)$$

Здесь компоненты тензора диэлектрической проницаемости являются функциями координаты r , поэтому уравнения (37) справедливы как в плазме, так и вне плазмы. Подставляя второе выражение (36) в (14) и учитывая (12), преобразуем уравнение внешней цепи к виду

$$U_0 = IR_0 - \pi R_S N_S \sum_{n=1} P_n E_{\varphi n}(R_S), \quad (38)$$

где

$$P_n = \int_0^\pi \sin nx dx / \int_0^\pi \sin^2 nx dx = 2 \frac{1 - \cos \pi n}{\pi n}. \quad (39)$$

Наконец, подставляя второе выражение (36) в граничное условие (6), получаем

$$\begin{aligned} \frac{dE_{\varphi n}}{dr}(R_S + 0) - \frac{dE_{\varphi n}}{dr}(R_S - 0) = \\ = -i \frac{\omega}{c} \frac{4\pi}{c} \frac{2}{L_S} \int_0^{L_S} J(z) \sin(k_{zn}z) dz. \end{aligned} \quad (40)$$

Если плотность обмотки соленоида постоянна по длине соленоида и число витков достаточно велико, то граничное условие (40) упрощается. Тогда, с учетом непрерывности тангенциальных составляющих электрического поля (7), имеем следующие граничные условия для уравнений (37):

$$\begin{aligned} E_{\varphi n}(R_S + 0) - E_{\varphi n}(R_S - 0) &= 0, \\ E_{zn}(R_S + 0) - E_{zn}(R_S - 0) &= 0, \\ \frac{dE_{\varphi n}}{dr}(R_S + 0) - \frac{dE_{\varphi n}}{dr}(R_S - 0) &= \\ = -i \frac{\omega}{c} \frac{4\pi}{c} \frac{N_S}{L_S} I P_n. \end{aligned} \quad (41)$$

Заметим, что коэффициенты P_n зависят от конструкции катушки, охватывающей плазму, и от условий на продольных границах плазмы, т.е. в принципе P_n могут определяться какими-то другими формулами. Мы будем использовать формулы (39).

Исключая функции E_{rn} , запишем уравнения поля (37) в виде

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} (r E_{\varphi n}) - \left(\chi_n^2 - \frac{\omega^4}{c^4 \chi_n^2} g^2 \right) E_{\varphi n} = \\ = i \frac{\omega^2}{c^2} \frac{k_{zn}}{\chi_n^2} g \frac{dE_{zn}}{dr}, \\ \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{\varepsilon_\perp}{\chi_n^2} \frac{dE_{zn}}{dr} \right) - \varepsilon_{||} E_{zn} = \\ = -i k_{zn} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{g}{\chi_n^2} E_{\varphi n} \right), \end{aligned} \quad (42)$$

где

$$\chi_n^2 = k_{zn}^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_\perp. \quad (43)$$

Уравнения (42) справедливы как в объеме плазмы (при $r < R_S$), так и во внешнем пространстве (при $r > R_S$).

Анализ системы (42) начнем со случая отсутствия внешнего магнитного поля, когда $g = 0$, $\varepsilon_\perp = \varepsilon_{||}$. В этом случае второе уравнение системы (42) отцеплено от первого уравнения, и компоненту E_z , поскольку она не возбуждается азимутальным током, можно положить равной нулю. При этом первое уравнение упрощается:

$$\frac{d}{dr} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} r E_{\varphi n} - \chi_n^2 E_{\varphi n} = 0. \quad (44)$$

Если предположить, что выполнено неравенство

$$\omega < \pi c/L_S, \quad (45)$$

которое согласуется с общим условием квазистационарности, то ограниченное в нуле и на бесконечности решение уравнения (44) имеет вид

$$E_{\varphi n}(r) = \begin{cases} A_n I_1(\chi_n r), & r < R_S, \\ B_n K_1(\chi_{0n} r), & r > R_S, \end{cases} \quad (46)$$

где A_n и B_n — постоянные, а χ_{0n}^2 — величины (43), взятые при $\varepsilon_{\perp} = 1$.

При большой длине соленоида, или в высокочастотной области, неравенство (45) является слишком жестким. Если не использовать неравенство (45), то возникает трудность при записи ограниченного на бесконечности решения уравнения (44). В этом случае решение можно выразить через функцию Ганкеля $H_1^{(1)}(\sqrt{\omega^2/c^2 - k_{zn}^2}r)$ (см. вывод формулы (26)), а можно предположить, что соленоид заключен в проводящий цилиндрический кожух радиуса $r = \mathcal{R} > R_S$. При наличии кожуха вместо (46) имеем следующее решение:

$$E_{\varphi n}(r) = \begin{cases} A_n I_1(\chi_n r), & r < R_S, \\ B_n [K_1(\chi_{0n} r) I_1(\chi_{0n} \mathcal{R}) - I_1(\chi_{0n} r) K_1(\chi_{0n} \mathcal{R})] \equiv B_n X_1(\chi_{0n} r), & R_S < r < \mathcal{R}. \end{cases} \quad (47)$$

Для определения постоянных A_n и B_n решение (46) сшивается в точке $r = R_S$ при помощи первого и третьего условий (41). В результате для азимутальной составляющей напряженности электрического поля соленоида без проводящего кожуха получаем следующее выражение (при $r \leq R_S$):

$$E_{\varphi n}(r) = i \frac{\omega}{c} \frac{4\pi}{c} \frac{N_S}{L_S} P_n \frac{I_1(\chi_n r) K_1(\chi_{0n} R_S)}{\chi_n I_0(\chi_n R_S) K_1(\chi_{0n} R_S) + \chi_{0n} I_1(\chi_n R_S) K_0(\chi_{0n} R_S)} I. \quad (48)$$

Подставляя (48) в уравнение цепи (38) и учитывая формулу (15), получим следующее выражение для импеданса ограниченного плазменного соленоида без кожуха в отсутствие внешнего магнитного поля

$$Z_S(\omega) = -i\omega\Lambda_0 \sum_{n=1} P_n^2 \frac{I_1(\chi_n R_S) K_1(\chi_{0n} R_S)}{\chi_n R_S I_0(\chi_n R_S) K_1(\chi_{0n} R_S) + \chi_{0n} R_S I_1(\chi_n R_S) K_0(\chi_{0n} R_S)}. \quad (49)$$

В случае плазменного соленоида с проводящим кожухом (в этом случае вместо (46) берется решение (47)) комплексный импеданс имеет вид

$$Z_S(\omega) = -i\omega\Lambda_0 \sum_{n=1} P_n^2 \frac{I_1(\chi_n R_S) X_1(\chi_{0n} R_S)}{\chi_n R_S I_0(\chi_n R_S) X_1(\chi_{0n} R_S) + \chi_{0n} R_S I_1(\chi_n R_S) X_0(\chi_{0n} R_S)}, \quad (49a)$$

где $X_0(\chi_{0n} r) = K_0(\chi_{0n} r) I_1(\chi_{0n} \mathcal{R}) + I_0(\chi_{0n} r) K_1(\chi_{0n} \mathcal{R})$. Формулой (49) можно пользоваться только в частотном диапазоне (45). В случае формулы (49a) подобное ограничение отсутствует.

Знаменатели в выражении (49)

$$D_{Bn}(\chi_n R_S) \equiv \chi_n I_0(\chi_n R_S) K_1(\chi_{0n} R_S) + \chi_{0n} I_1(\chi_n R_S) K_0(\chi_{0n} R_S) \quad (50)$$

являются дисперсионными функциями для волн B -типа плазменного цилиндра со свободной поверхностью. Таких волн в плазменном цилиндре без внешнего магнитного поля нет, поскольку дисперсионные уравнения $D_{Bn} = 0$ при $\nu_e = 0$ вещественных ре-

шений относительно частоты ω не имеют⁶⁾. Таким образом, у импеданса (49) резонансные особенности — нули и полюса — отсутствуют. Следовательно, отсутствует и резонансное поглощение мощности внешнего источника в ограниченном плазменном соленоиде без кожуха и внешнего магнитного поля. Ранее тот же результат был получен для однородного соленоида, при расчете которого полагалось $\partial/\partial z = 0$ (см. формулы (30) и (31)). У импеданса, определяемого формулой (49a), резонансные особенности имеются, но только в высокочастотной обла-

⁶⁾ Комплексные решения соответствуют затухающим возмущениям поля. Затухание обусловлено свободным излучением в окружающее плазменный цилиндр пространство. Плазменный цилиндр со свободной поверхностью для полей B -типа волноводом не является.

сти, где квазистационарное приближение, а значит и само понятие импеданса, неприменимы.

На рис. 5 представлен комплексный импеданс (49) ограниченного плазменного соленоида с однородной плотностью обмотки в отсутствие внешнего магнитного поля при $\omega_{Le}R_S/c = 0.5$, $\nu_e = 0.03\omega_{Le}$, $L_S/R_S = 2$. Монотонный характер представленных зависимостей свидетельствует об отсутствии резонансов, связанных с возбуждением собственных волн B -типа в плазменном цилиндре со свободной поверхностью. Приведенная на рис. 5 зависимость мнимой части импеданса свидетельствует об отсутствии зависимости индуктивности от частоты. Примерно такой же вид имеет импеданс соленоида, рассчитанный по формуле (49а).

Импеданс и индуктивность ограниченного соленоида зависят от его длины L_S . От длины зависит и индуктивность вакуумного соленоида Λ_0 , но в случае ограниченного плазменного соленоида эта зависимость существенно более сильная. На рис. 6 в зависимости от длины L_S показана относительная индуктивность плазменного соленоида Λ_S/Λ_0 , вычис-

ленная по импедансу (49а). При больших значениях L_S она стремится к относительной индуктивности плазменного соленоида большой длины, вычисленной по импедансу (28а). Интуитивно ясно, что чем длиннее соленоид, тем меньше влияние его границ $z = 0, L_S$. Рис. 6 свидетельствует, что это именно так.

При нарушении условия квазистационарности формулы (49) и (49а) непригодны, непригодна и формула (48) для гармоник азимутальной составляющей напряженности электрического поля, поскольку не учитывает излучения через боковую поверхность соленоида. Вместо учета излучения предположим наличие проводящего кожуха радиуса $\mathcal{R}$, охватывающего соленоид. Поле в плазме в этом случае дается формулой (48), в которой функции $K_{0,1}(\chi_{0n}R_S)$ заменены на $X_{0,1}(\chi_{0n}R_S)$. Подставляя $E_{\varphi n}(r)$ во вторую формулу (36), а затем в формулу (22), после интегрирования по объему соленоида получим следующее выражение для мощности источника, выделяемой в плазменном соленоиде с кожухом в отсутствие внешнего магнитного поля:

$$W(\omega) = \omega \frac{\Lambda_0 I^2}{2} \varepsilon_{\perp}'' \sum_n \left| \frac{(\omega/c) X_1(\chi_{0n} R_S)}{\chi_n I_0(\chi_n R_S) X_1(\chi_{0n} R_S) + \chi_{0n} I_1(\chi_n R_S) X_0(\chi_{0n} R_S)} \right|^2 \frac{P_n^2}{R_S^2} \int_0^{R_S} I_1(\chi_n r) I_1(\chi_n^* r) r dr \quad (51)$$

Для плазменного соленоида с параметрами $\omega_{Le}R_S/c = 5$, $\nu_e = 0.03\omega_{Le}$, $L_S/R_S = 2$ и $\mathcal{R}/R_S = 1.6$ мощность (51) приведена на рис. 7. Видно, что за пределами квазистационарной области частот появились максимумы мощности. Они обусловлены резонансным возбуждением источником собственных волн B -типа волновода радиуса $\mathcal{R}$ с плазменным цилиндром радиуса R_S . Можно показать, что в знаменателе выражения под знаком модуля в (51) находится дисперсионная функция именно этих волн (эта же функция находится в знаменателе выражения (49а)).

5. ОГРАНИЧЕННЫЙ ПЛАЗМЕННЫЙ СОЛЕНОИД С МАГНИТОАКТИВНОЙ ПЛАЗМОЙ

Перейдем теперь к общему случаю магнитоактивной плазмы. В области $r < R_S$ решение уравне-

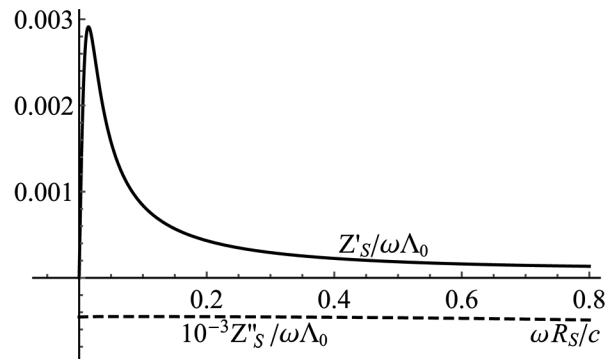


Рис. 5. Комплексный импеданс ограниченного плазменного соленоида без кожуха в отсутствие внешнего магнитного поля

ний (42) ищем в виде

$$\begin{aligned} E_{\varphi n} &= A_n J_1(\kappa_n r), \\ E_{zn} &= B_n J_0(\kappa_n r), \end{aligned} \quad (52)$$

где A_n, B_n — постоянные, а κ_n — неизвестные собственные значения. Подстановка (52) в уравнения

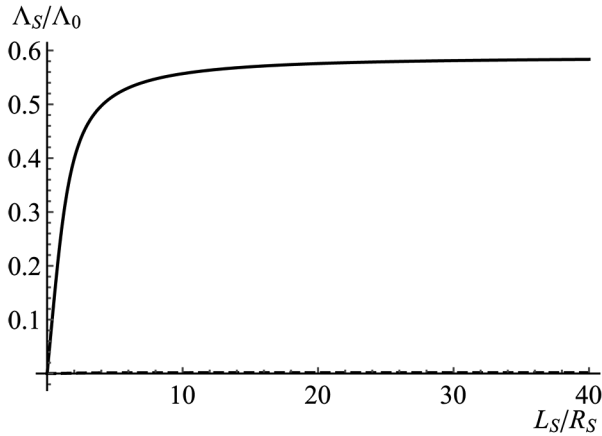


Рис. 6. Индуктивность ограниченного плазменного соленоида в зависимости от его длины

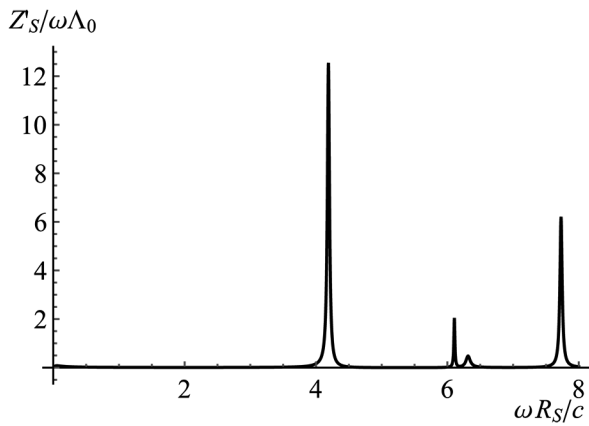


Рис. 7. Эффективное сопротивление ограниченного плазменного соленоида с кожухом в отсутствие внешнего магнитного поля

(42) приводит к однородной системе двух уравнений для A_n, B_n

$$\begin{aligned} \left[\kappa_n^2 + \left(\chi_n^2 - \frac{\omega^4}{c^4 \chi_n^2} g^2 \right) \right] A_n &= i \frac{\omega^2}{c^2} \frac{k_{zn} \kappa_n}{\chi_n^2} g B_n, \\ \left(\kappa_n^2 + \frac{\varepsilon_{||}}{\varepsilon_{\perp}} \chi_n^2 \right) B_n &= i k_{zn} \kappa_n \frac{g}{\varepsilon_{\perp}} A_n. \end{aligned} \quad (53)$$

Откуда получается уравнение для определения собственных значений κ_n

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\perp} \kappa_n^4 + \left[\chi_n^2 (\varepsilon_{\perp} + \varepsilon_{||}) + \frac{\omega^2}{c^2} g^2 \right] \kappa_n^2 + \\ + \left(\chi_n^4 - \frac{\omega^4}{c^4} g^2 \right) \varepsilon_{||} = 0 \end{aligned} \quad (54)$$

и соотношение между постоянными в решении (52)

$$B_n = i \frac{k_{zn} \kappa_n g}{\varepsilon_{||} \chi_n^2 + \varepsilon_{\perp} \kappa_n^2} A_n \equiv i \beta(\kappa_n) A_n. \quad (55)$$

Корни биквадратного уравнения (54) запишем в виде $\kappa_{n1}, -\kappa_{n1}, \kappa_{n2}, -\kappa_{n2}$, где

$$\begin{aligned} \kappa_{n1,2}^2 = \frac{1}{2\varepsilon_{\perp}} \left\{ -(\varepsilon_{\perp} + \varepsilon_{||}) \chi_n^2 - g^2 \frac{\omega^2}{c^2} \pm \right. \\ \left. \pm \sqrt{[(\varepsilon_{\perp} - \varepsilon_{||}) \chi_n^2 + g^2 \frac{\omega^2}{c^2}]^2 + 4\varepsilon_{||} g^2 k_{zn}^2 \frac{\omega^2}{c^2}} \right\}. \end{aligned} \quad (56)$$

Поскольку $J_1(-z) = -J_1(z)$, $J_0(-z) = J_0(z)$, $\beta(-z) = -\beta(z)$, то с учетом (52) общее решение первых двух уравнений системы (42) оказывается следующим:

$$\begin{aligned} E_{\varphi n} &= A_{n1} J_1(\kappa_{n1} r) + A_{n2} J_1(\kappa_{n2} r), \\ E_{zn} &= i \beta(\kappa_{n1}) A_{n1} J_0(\kappa_{n1} r) + i \beta(\kappa_{n2}) A_{n2} J_0(\kappa_{n2} r), \end{aligned} \quad (57)$$

где $A_{n1,2}$ — постоянные.

В вакуумной области $r > R_S$ ограниченные решения первых двух уравнений (42) имеют вид

$$\begin{aligned} E_{\varphi n} &= C_n K_1(\chi_{0n} r), \\ E_{zn} &= D_n K_0(\chi_{0n} r), \end{aligned} \quad (58)$$

где C_n и D_n — постоянные. Если плазменный соленоид имеет проводящий цилиндрический кожух, то при $R > r > R_S$ записывается следующее решение:

$$\begin{aligned} E_{\varphi n} &= C_n X_1(\chi_{0n} r), \\ E_{zn} &= D_n [K_0(\chi_{0n} r) I_0(\chi_{0n} R) - \\ &- I_0(\chi_{0n} r) K_0(\chi_{0n} R)] \equiv D_n Z_0(\chi_{0n} r), \end{aligned} \quad (59)$$

где функция $X_1(\chi_{0n} r)$ приведена в (47).

Для определения постоянных $A_{n1,2}$, C_n и D_n решения (57) и (58) следует сшить в точке $r = R_S$. Однако, трех условий сшивки — граничных условий (41) — недостаточно для определения четырех постоянных в решениях (57) и (58). Недостающее, четвертое условие получается интегрированием второго уравнения системы (42) в окрестности точки $r = R_S$, что дает

$$\left\{ \frac{\varepsilon_{\perp}}{\chi_n^2} \frac{dE_{zn}}{dr} + i k_{zn} \frac{g}{\chi_n^2} E_{\varphi n} \right\}_{r=R_S} = 0. \quad (60)$$

Используя систему (3), можно показать, что (60) эквивалентно условию непрерывности на границе плазмы тангенциальной составляющей индукции магнитного поля B_{φ} , или нормальной составляющей индукции электрического поля $D_r = \varepsilon_{\perp} E_r + i g E_{\varphi}$.

Сшивая при помощи полученных условий решения (57) и (58), выразим постоянные $A_{n1,2}$, C_n , D_n и найдем следующее выражение:

$$E_{\varphi n}(r) = i \frac{\omega}{c} \frac{4\pi}{c} I \frac{N_S}{L_S} P_n K_1(\chi_{0n} R_S) \times \\ \times \left(\frac{D_{En}(\kappa_{n2} R_S)}{D_n} J_1(\kappa_{n1} r) - \frac{D_{En}(\kappa_{n1} R_S)}{D_n} J_1(\kappa_{n2} r) \right), \quad (61)$$

где

$$D_n = D_{En}(\kappa_{n2} R_S) D_{Bn}(\kappa_{n1} R_S) - \\ - D_{En}(\kappa_{n1} R_S) D_{Bn}(\kappa_{n2} R_S), \quad (62)$$

$$D_{Bn}(\kappa_{n1,2} R_S) = \chi_{0n} J_1(\kappa_{n1,2} R_S) K_0(\chi_{0n} R_S) + \\ + \kappa_{n1,2} J_0(\kappa_{n1,2} R_S) K_1(\chi_{0n} R_S), \\ D_{En}(\kappa_{n1,2} R_S) = (J_0(\kappa_{n1,2} R_S) K_1(\chi_{0n} R_S) \chi_{0n}^{-1} - \\ - \varepsilon_{\perp} \kappa_{n1,2} J_1(\kappa_{n1,2} R_S) K_0(\chi_{0n} R_S) \chi_n^{-2}) \beta(\kappa_{n1,2}) + \\ + k_{zn} g \chi_n^{-2} J_1(\kappa_{n1,2} R_S) K_0(\chi_{0n} R_S). \quad (63)$$

Выражения D_n являются дисперсионными функциями смешанных, т.е. B - и E -типов, электромагнитных волн магнитоактивного плазменного цилиндра со свободной поверхностью. Имея в виду предельный переход к нулевому внешнему магнитному полю, можно условно назвать функции $D_{Bn}(\kappa_{n1,2} R_S)$ дисперсионными функциями волн B -типа, а $D_{En}(\kappa_{n1,2} R_S)$ — дисперсионными функциями волн E -типа (см. формулу (50)).

Подставляя (61) в уравнение внешней цепи (38), стандартным образом получаем следующее выражение для комплексного импеданса соленоида, заполненного однородной магнитоактивной плазмой:

$$Z_S(\omega) = -i\omega\Lambda_0 \sum_{n=1} P_n^2 \frac{(D_{En}(\kappa_{n2} R_S) J_1(\kappa_{n1} R_S) - D_{En}(\kappa_{n1} R_S) J_1(\kappa_{n2} R_S)) K_1(\chi_{0n} R_S)}{R_S (D_{En}(\kappa_{n2} R_S) D_{Bn}(\kappa_{n1} R_S) - D_{En}(\kappa_{n1} R_S) D_{Bn}(\kappa_{n2} R_S))}. \quad (64)$$

В нулевом магнитном поле формула (64) переходит в формулу (49).

При получении формулы (64) мы полагали, что проводящий кожух у соленоида отсутствует. Если проводящий кожух имеется, то следует использовать решение (59). Тогда, почти полностью повторяя вывод формулы (64), получим следующее выражение для импеданса ограниченного плазменного соленоида с проводящим кожухом во внешнем магнитном поле:

$$Z_S(\omega) = -i\omega\Lambda_0 \sum_{n=1} P_n^2 \frac{(D_{En}(\kappa_{n2} R_S) J_1(\kappa_{n1} R_S) - D_{En}(\kappa_{n1} R_S) J_1(\kappa_{n2} R_S)) X_1(\chi_{0n} R_S)}{R_S (D_{En}(\kappa_{n2} R_S) D_{Bn}(\kappa_{n1} R_S) - D_{En}(\kappa_{n1} R_S) D_{Bn}(\kappa_{n2} R_S))}, \quad (64a)$$

а дисперсионные функции определяются формулами

$$D_{Bn}(\kappa_{n1,2} R_S) = \chi_{0n} J_1(\kappa_{n1,2} R_S) X_0(\chi_{0n} R_S) + \kappa_{n1,2} J_0(\kappa_{n1,2} R_S) X_1(\chi_{0n} R_S), \\ D_{En}(\kappa_{n1,2} R_S) = \beta(\kappa_{n1,2}) (J_0(\kappa_{n1,2} R_S) Z_1(\chi_{0n} R_S) \chi_{0n}^{-1} - \varepsilon_{\perp} \kappa_{n1,2} J_1(\kappa_{n1,2} R_S) Z_0(\chi_{0n} R_S) \chi_n^{-2}) + \\ + k_{zn} g \chi_n^{-2} J_1(\kappa_{n1,2} R_S) Z_0(\chi_{0n} R_S), \quad (65)$$

где $Z_1(\chi_{0n} r) = K_1(\chi_{0n} r) I_0(\chi_{0n} R) + I_1(\chi_{0n} r) K_0(\chi_{0n} R)$.

Решение (59) имеет смысл при любом знаке величин χ_{0n}^2 (в отличие от решения (58), полученного при $\chi_{0n}^2 > 0$), и применимость формулы (64a) не ограничивается условием (45). Поэтому в (64a) оказывается возможным предельный переход к соленоиду бесконечной длины $L_S \rightarrow \infty$, или $k_{zn} \rightarrow 0$. В этом пределе из формул (56) и (55) имеем $\kappa_{n1}^2 \rightarrow (\omega^2/c^2) \varepsilon_{\parallel}$, $\kappa_{n2}^2 \rightarrow (\omega^2/c^2) \varepsilon_{\perp} \equiv \kappa_2^2$ ($\varepsilon_{\perp}$ см. в (24)), $\beta(\kappa_{n1}) \rightarrow \text{const} \neq 0$, $\beta(\kappa_{n2}) \rightarrow 0$. Тогда, с учетом (65), формула (64a) преобразуется к виду

$$Z_S(\omega) = -i\omega\Lambda_0 \frac{J_1(\kappa_2 R_S) X_1(i\omega R_S/c)}{R_S (\chi_{0n} J_1(\kappa_2 R_S) X_0(i\omega R_S/c) + \kappa_2 J_0(\kappa_2 R_S) X_1(i\omega R_S/c))} \sum_{n=1} P_n^2. \quad (66)$$

Принимая во внимание соотношение

$$\sum_{n=1} P_n^2 = \frac{4}{\pi^2} \sum_{n=1} \left(\frac{1 - (-1)^n}{n} \right)^2 = 2, \quad (67)$$

видим, что формула (66) в точности переходит в формулу (28a) индуктивности однородного соленоида. Таким образом, однородным может считаться соленоид очень большой длины. Но это и понятно,

поскольку при большой длине соленоида условия на его торцах существенной роли не играют.

Уравнение

$$D_n \equiv D(\omega, k_{zn}) = D_{En}(\kappa_{n2}R_S)D_{Bn}(\kappa_{n1}R_S) - D_{En}(\kappa_{n1}R_S)D_{Bn}(\kappa_{n2}R_S) = 0 \quad (68)$$

определяет частоты $\omega_s(k_{zn})$ собственных волн плазменного цилиндра радиуса R_S (со свободной поверхностью, или в волноводе радиуса R) во внешнем магнитном поле. При этом индекс s обозначает номер ветви плазменных волн, а n совпадает с индексом суммирования в (64) и (64а). Эти же частоты определяют полюса $\omega_{sn}^{(\infty)} = \omega_s(k_{zn})$ импедансов (64) и (64а). Достаточно сложное уравнение (68) в различных предельных случаях исследовалось в теории плазменных волноводов [35]. Точное уравнение для нулей импеданса, из-за наличия в (64) и (64а) бесконечной суммы, вообще нельзя записать в явном виде. Поэтому нельзя в общем виде определить имеются ли у импедансов (64) и (64а) нули. При расчетах, проводившихся для конкретных случаев, нули импедансов обнаружены не были. Напомним, что в полюсах импеданса реализуется резонанс токов, а в нулях — резонанс напряжений. Таким образом, в ограниченном плазменном соленоиде во внешнем магнитном поле резонансы токов возможны, а резонансы напряжений, скорее всего, отсутствуют. То же самое, исходя из предыдущих результатов, можно сказать и об однородном плазменном соленоиде.

Рассмотрим механизмы передачи энергии внешнего источника магнитоактивной плазмы, находящейся в соленоиде. Все эти механизмы учтены в формулах (64) и (64а). Высокочастотное электромагнитное поле соленоида имеет структуру B -типа. Вынужденные колебания этого типа и будут возбуждаться в плазме. Но при наличии в плазме конечного внешнего магнитного поля колебания B -типа и E -типа оказываются зацепленными между собой. Таким образом, в соленоиде с магнитоактивной плазмой на частоте внешнего источника ω возбуждаются вынужденные смешанные электромагнитные колебания обоих типов. Наиболее интенсивное возбуждение колебаний в плазме происходит при совпадении частоты источника с частотами собственных волн плазменной системы, т.е. при $\omega \approx \omega_{sn}^{(\infty)} = \omega_s(k_{zn})$, где $\omega_s(k_{zn})$ определяются из уравнений (68). Естественно, что наиболее сильное поглощение энергии внешнего источника в плазме происходит на тех же частотах. Именно зацеплением электромагнитных волн B -типа и E -типа случай магнитоактивной плазмы в соленоиде отличается от

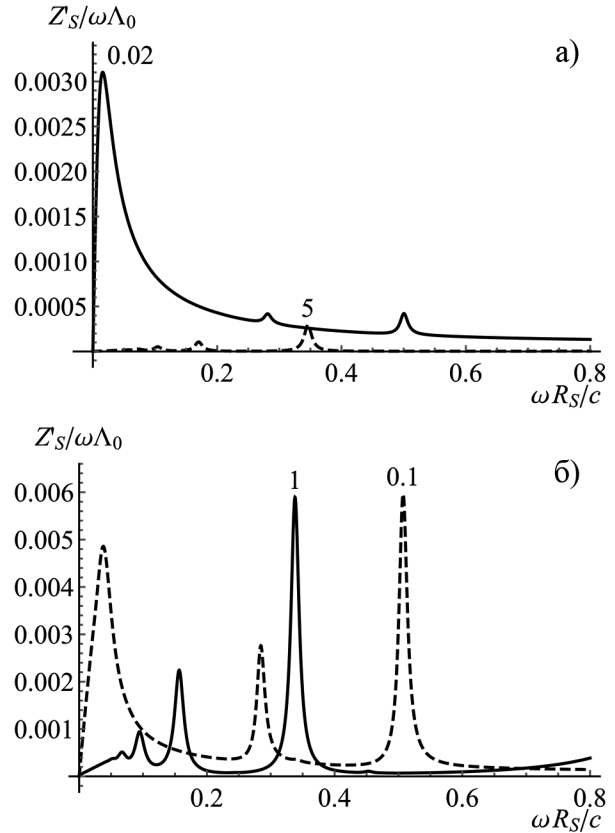


Рис. 8. Вещественная часть импеданса ограниченного плазменного соленоида без кожуха во внешнем магнитном поле для $\omega_{Le}R_S/c = 0.5$, $\nu_e = 0.03\omega_{Le}$, $L_S/R_S = 2$. Числа около кривых соответствуют значению $\Omega_e R_S/c$

случая плазменного соленоида без магнитного поля (возбуждаются только колебания B -типа) и от случая плазмы в конденсаторе (возбуждаются только колебания E -типа) [18]. Следовательно, применение магнитоактивной плазмы позволяет задействовать плазменные волны всех типов в качестве индуктивных каналов резонансной перекачки энергии источника в плазму. Особый интерес представляют волны E -типа из-за их низкой частоты. Более того, в плазменном цилиндре собственных электромагнитных волн B -типа в низкочастотной области вообще нет (кроме волн (33) с частотами, близкими к верхней гибридной частоте).

Известно [35], что в плазменном волноводе в случае слабого внешнего магнитного поля, когда $\Omega_e < \omega_{Le}$, имеются три группы волн E -типа. В низкочастотной области $\omega < \Omega_e$ располагаются частоты объемных косых циклотронных волн. В промежуточной области частот $\Omega_e < \omega < \omega_{Le}$ лежит частота поверхностной ленгмюровской волны. В высокочастотной области $\omega_{Le} < \omega < \Omega_g$ расположены частоты

косых ленгмюровских волн. В случае сильного внешнего магнитного поля, когда $\Omega_e > \omega_{Le}$, поверхностной волны нет, частоты косых ленгмюровских волн расположены в области $\omega < \omega_{Le}$, а частоты косых циклотронных волн принадлежат диапазону $\Omega_e < \omega < \Omega_g$.

На рис. 8 представлены результаты расчета вещественной части импеданса ограниченного плазменного соленоида, выполненные по формуле (64) для $\omega_{Le}R_S/c = 0.5$, $\nu_e = 0.03\omega_{Le}$, $L_S/R_S = 2$ и различных значений $\Omega_e R_S/c = 0.02, 0.1, 1, 5$. При малом значении магнитного поля кривая аналогична кривой на рис. 5, построенной для случая нулевого магнитного поля. В отсутствие внешнего магнитного поля имеются только волны E -типа, возбуждение которых азимутальным током не происходит и резонансного поглощения энергии в плазме нет. При ненулевом значении магнитного поля волны E -типа и B -типа оказываются связанными и возбуждение такой волны азимутальным током становится возможным. Это и проявляется появлением пиков резонансного поглощения на рис. 8 для кривой, соответствующей $\Omega_e R_S/c = 0.02$. Правый из этих пиков соответствует возбуждению объемной ленгмюровской волны с частотой близкой к ленгмюровской, а левый — поверхностной волне с частотой порядка $\omega_{Le}/\sqrt{2}$. При увеличении магнитного поля до значений $\Omega_e R_S/c = 0.1$ связь между волнами усиливается и пики поглощения возрастают, в том числе формируется и низкочастотный пик циклотронного поглощения. В сильном магнитном поле ($\Omega_e > \omega_{Le}$), при $\Omega_e R_S/c = 1$, на рис. 8 в квазистационарной области частот, проявляются только пики низкочастотных ленгмюровских волн. Они же сохраняются и в случае $\Omega_e R_S/c = 5$, но их величина заметно уменьшается, в соответствии с тем, что в сильном магнитном поле волны трансформируются в волны E -типа, которые не возбуждаются азимутальным током. Во всех рассмотренных случаях мнимая часть импеданса практически не зависит от величины внешнего магнитного поля и совпадает с зависимостью, изображенной на рис. 5.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе системы уравнений Максвелла в холодной столкновительной магнитоактивной плазме рассмотрены электродинамические свойства плазменного столба и динамика возбуждения электромагнитных полей азимутальным током на его поверхности при произвольных соотношениях меж-

ду частотой возбуждающего генератора, электронной циклотронной частотой и плазменной частотой. Рассмотрены случаи безграничного и продольно ограниченного плазменного соленоида. Вычислялись комплексный импеданс системы и эффективное сопротивление как величина, характеризующая поглощаемую в плазме мощность. Несмотря на ограниченность понятия комплексного импеданса квазистационарным случаем, тем не менее вещественная часть импеданса оказывается совпадающей с эффективным сопротивлением, понятие которого имеет более широкую область применимости не ограниченную условием квазистационарности. Резонансные свойства комплексного импеданса и эффективного сопротивления плазмы связаны с возможностью возбуждения в системе собственных электромагнитных волн с последующей их столкновительной диссипацией. Уширение резонансных линий определяется как частотой электронных столкновений, так и возможностью радиального выноса энергии в открытой системе. В системе без кожуха в достаточно слабом или, наоборот, достаточно сильном внешнем магнитном поле доминирующими оказываются только волны E -типа, возбуждение которых азимутальным током не происходит и резонансный характер поглощения энергии в плазме не проявляется. При промежуточном значении магнитного поля волны E -типа и B -типа оказываются связанными и возбуждение такой волны азимутальным током становится возможным. Это и проявляется появлением пиков резонансного поглощения, связанных с возбуждением объемных или поверхностных ленгмюровских волн, а также циклотронных волн.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 22-29-00642).

ЛИТЕРАТУРА

1. S. Shinohara, Adv. in Phys.: X **3**, 1420424 (2018); doi:10.1080/23746149.2017.1420424.
2. S. Isayama, S. Shinohara, and T. Hada, Plasma and Fusion Research **13**, 1101014 (2018); doi:10.1585/pfr.13.1101014.
3. F. F. Chen, Plasma Sources Sci. Technol. **24**, 014001 (2015); doi:10.1088/0963-0252/24/1/014001.
4. Е. А. Кралькина, УФН **178**, 519 (2008); [Е. А. Kral'kina, Phys. Usp. **51**, 493 (2008); doi:10.1070/PU2008v051n05ABEH006422].

5. S. Shinohara et al., IEEE Trans. on Plasma Science **42**, 1245 (2014).
6. F. F. Chen, Phys. Plasmas **21**, 093511 (2014); doi:10.1063/1.4896238.
7. F. F. Chen, IEEE Trans. on Plasma Science **43**, 195 (2015).
8. S. Shinohara et al., IEEE Trans. on Plasma Science **46**, 252 (2018).
9. S. Samukawa et al., J. Phys. D: Appl. Phys. **45**, 253001 (2012); doi:10.1088/0022-3727/45/25/253001.
10. В. Л. Вдовин, Физика плазмы **39**, 115 (2013) [V.L.Vdovin, Plas. Phys. Rep. **39**, 95 (2013); doi:10.1134/S1063780X13020037].
11. C. Lau et al., Nucl. Fusion **58**, 066004 (2018); doi:10.1088/1741-4326/aab96d.
12. R. W. Boswell, Phys. Lett. A **33**, 457 (1970); doi:10.1016/0375-9601(70)90606-7.
13. R. W. Boswell, Plasma Physics and Controlled Fusion **26**, 1147 (1984).
14. R. W. Boswell, Australian J. Phys. **25**, 403 (1972); doi:10.1071/PH720403.
15. R.W. Boswell, J. Plas. Phys. **31** (2), 197-208 (1984); doi:10.1017/S0022377800001550.
16. F. F. Chen, Plasma Physics and Controlled Fusion **33**, 339 (1991); doi:10.1088/0741-3335/33/4/006.
17. K. P. Shamrai and V. B. Taranov, Plasma Physics and Controlled Fusion **36**, 1719 (1994).
18. И.Н. Карташов, М.В. Кузелев, ЖЭТФ, **158**, 738 (2020) [I. N. Kartashov, M. V. Kuzelev, J. Exp. Theor. Phys. **131**, 645 (2020); doi:10.1134/S1063776120090162].
19. H. Tamura et al., IEEE Trans. on Plasma Science **46**, 3662 (2018).
20. Д. С. Степанов, А. В. Чеботарев, Э. Я. Школьников, ТВТ **57**, 347 (2019) [D. S. Stepanov, A. V. Chebotarev, and E. Y. Shkol'nikov, High Temp. **57**, 316 (2019); doi:10.1134/S0018151X19030155].
21. И. Н. Карташов, М. В. Кузелев, ТВТ **56**, 346 (2018) [I. N. Kartashov and M. V. Kuzelev, High Temp. **56**, 334 (2018); doi:10.1134/S0018151X18030100].
22. И. Н. Карташов, М. В. Кузелев, ЖЭТФ **156**, 355 (2019) [I. N. Kartashov and M. V. Kuzelev, J. Exp. Theor. Phys. **129**, 2981 (2019); doi:10.1134/S106377611907015X].
23. И. С. Абрамов, Е. Д. Господчиков, А. Г. Шалашов, ЖЭТФ **156**, 528 (2019) [I. S. Abramov, E. D. Gospodchikov, and A. G. Shalashov, J. Exp. Theor. Phys. **129**, 444 (2019); doi:10.1134/S106377611907001X].
24. E. A. Kralkina et al., AIP Advances **8**, 035217 (2018); doi:10.1063/1.5023631.
25. E. A. Kralkina et al., Plasma Sources Sci. Technol. **26**, 055006 (2017); doi:10.1088/1361-6595/aa61e6.
26. E. A. Kralkina et al., Plasma Sources Sci. Technol. **25**, 015016 (2016); doi:10.1088/0963-0252/25/1/015016.
27. А. Ф. Александров, М. В. Кузелев, *Теоретическая плазменная электротехника*, Изд. физического ф-та МГУ, Москва (2011).
28. В. Л. Гинзбург, А. А. Рухадзе, *Волны в магнитоактивной плазме*, URSS, Москва (2013).
29. И. Н. Карташов, М. В. Кузелев, Радиотехника и электроника **68**, 1165 (2023) [I. N. Kartashov and M. V. Kuzelev, J. Comm. Tech. Electr. **68**, 1394 (2023); doi:10.1134/S1064226923120094].
30. А. А. Самарский, Ю. П. Попов, *Разностные методы решения задач газовой динамики*, Наука, Москва (1975).
31. Д. В. Сивухин, *Общий курс физики. Т.3. Электричество*, ФИЗМАТЛИТ, Москва (2004).
32. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, ФИЗМАТЛИТ, Москва (2005).
33. А. Ф. Александров, Л. С. Богданкевич, А. А. Рухадзе, *Основы электродинамики плазмы*, Высшая школа, Москва (1988) [A. F. Alexandrov, L. S. Bogdankevich, and A. A. Rukhadze, *Principles of Plasma Electrodynamics*, Springer Verlag, Heidelberg (1984)].
34. А. Н. Тихонов, А. А. Самарский, *Уравнения математической физики*, Изд. Московского университета, Москва (1999).
35. М. В. Кузелев, А. А. Рухадзе, П. С. Стрелков, *Плазменная релятивистская СВЧ-электроника*, ЛЕНАНД, Москва (2018).

О ВОЗДЕЙСТВИИ ПОТОКА ИОНОВ ГЕЛИЕВОЙ ПЛАЗМЫ ПОВЫШЕННОЙ ЭНЕРГИИ НА НАНОСТРУКТУРУ ВОЛЬФРАМА

В. В. Кулагин^{a,b}, М. М. Цвентух^{a**}*

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

^b *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
115409, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 21 ноября 2023 г.,
после переработки 17 января 2024 г.
Принята к публикации 18 января 2024 г.

Рассмотрены процессы образования плазмы из нановолокон вольфрама, содержащих пузыри гелия, под воздействием потока энергии и частиц из гелиевой плазмы в условиях повышенного до сотен вольт пристеночного потенциала, когда наблюдается спонтанное инициирование всплесков взрывной электронной эмиссии. Показано, что для развития моделей инициирования под внешним воздействием потока энергии и частиц требуется учет гетерофазной структуры нановолокон. Методом молекулярной динамики проведено атомистическое моделирование взаимодействия налетающего атома гелия повышенной энергии (100–500 эВ) с ансамблем атомов гелия в наноразмерном пузыре с твердотельной концентрацией газа (10^{29} м^{-3}), удерживаемом в приповерхностном слое вольфрама. Получено время релаксации энергии в гетерофазной системе нанопузыря в вольфраме, составляющее единицы пикосекунд. Показано, что при энергии падающих частиц на уровне сотен электронвольт возможен перегрев приповерхностных нанопузырей, который приводит к их взрыву за времена порядка 10 пс. Такая энергия сопоставима с полной энергией частиц нанопузыря, и при таком пристеночном потенциале наблюдаются спонтанные инициирования всплесков взрывной электронной эмиссии.

DOI: 10.31857/S0044451024050134

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время вольфрам рассматривается в качестве одного из основных материалов обращенных к плазме элементов будущих термоядерных установок, типа ИТЭР. Вольфрам характеризуется высокой температурой плавления, низким коэффициентом распыления, низким захватом изотопов водорода, но подвержен структурным изменениям при облучении поверхности ионами гелиевой плазмы. Облучение вольфрама гелием ведет к развитию морфологии поверхности с образованием наноструктур, известных как вольфрамовый нанопух [1].

Характерные условия образования вольфрамового пуха следующие: температура поверхности

$T = 900\text{--}2000 \text{ К}$, энергия ионов гелия $E_0 > 20 \text{ эВ}$, доза облучения $\Phi > 10^{20} \text{ см}^{-2}$ [2]. Характерный поперечный размер отдельных наноструктур обычно составляет порядка 10 нм, а их высота может достигать нескольких микрометров в зависимости от потока и дозы облучения. Важно отметить, что в данных наноструктурах также присутствует захваченный гелий как в растворенном состоянии, так и в виде сформировавшихся гелиевых пузырей [3]. Физические свойства вольфрамового нанопуха, как материала, обращенного к плазме, сильно отличаются от свойств в случае чистого вольфрама. Одним из негативных эффектов, связанных с образованием вольфрамового нанопуха, является повышенная вероятность зажигания униполярных дуг, что ведет к увеличению эрозии обращенной к плазме поверхности [4–6].

На данный момент механизмы роста и свойства вольфрамового пуха подробно исследовались для

* E-mail: v.kulagin@lebedev.ru

** E-mail: mmtsv@lebedev.ru, elley@list.ru

случая облучения поверхности вольфрама ионами гелия низкой энергии 20–100 эВ [7–11]. При этом для повышенной энергии (сотни электронвольт) рост волокон сменяется распылением, а также спонтанно инициируются «пробои» — всплески тока взрывной электронной эмиссии [12–14].

В данной работе исследуется процесс выделения энергии потока ионов внешней плазмы, падающего на наноструктуру, в условиях, соответствующих образованию металлической плазмы из нановолокон. В разд. 2 приводятся оценки свойств плазмы, образующейся в результате всплесков взрывной электронной эмиссии, следующие из теории вакуумного разряда и свойств наноструктуры. В разд. 3 обсуждается передача энергии при атомных столкновениях. В разд. 4 описано проведенное численное моделирование процессов релаксации энергии падающего атома гелия в гетерофазной системе с нанопузырем гелия в вольфраме методом молекулярной динамики. В разд. 5 содержится обсуждение полученных результатов.

2. ИНИЦИИРОВАНИЕ ПРОБОВ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ПЛАЗМЫ

Функционирование униполярных дуговых разрядов представляет собой импульсно-периодическое образование сгустков плазмы из материала поверхности за счет всплесков взрывной электронной эмиссии [15, 16]. Эквивалентный коэффициент распыления (отношение плотности вольфрама, покидающего стенку, к плотности плазмы) может достигать ~ 10 [17], что на порядки величины выше физического распыления вольфрама легкими ионами низких энергий [18, 19].

Для «чистой» поверхности был получен порог потока внешней энергии из плазмы q на уровне 200 МВт/см², который достаточен для компенсации интенсивного охлаждения поверхности эмиссией электронов и обеспечивает взрывную джоулев перегрев участков поверхности — взрывную эмиссию [20]. При этом, в случае малой плотности внешней плазмы и большой энергии ее частиц, данным большим потоком энергии q из материала поверхности может создаваться плотная плазма, обеспечивающая протекание эмиссионного тока высокой плотности j , достаточной для взрыва. Предельная величина составляет примерно

$$j_M \sim j_{pl} = en_{pl} \left(\frac{T_e}{2\pi m_e} \right)^{1/2}, \quad (1)$$

где n_{pl} и T_e — плотность плазмы и температура электронов в ней.

Присутствие развитой наноструктуры поверхности может существенно облегчить процесс формирования такой первичной плазмы, так как, очевидно, что из-за наноструктуры снижается количество связей между атомами вещества материала поверхности. В работе [5] была предложена модель «изолированного слоя» для оценки параметров такой плазмы. Концентрация атомов, согласно этой модели, может быть примерно оценена из равенства приходящего из плазмы потока энергии и потока энергии, уносимой испарением атомов вольфрама, а именно:

$$n_1 = n_{pl} \left(\frac{M_W}{M_{He}} \right)^{1/2} \frac{E_0^{3/2}}{E_{coh} T_W^{1/2}}, \quad (2)$$

где M_W и M_{He} — массы атомов вольфрама и гелия, E_0 — энергия падающих на поверхность ионов гелия, E_{coh} — энергия связи атомов вольфрама (в нормальных условиях $E_{coh} = 9$ эВ, но из-за наноструктуры может быть ниже [17, 21]), T_W — температура атомов слоя вольфрама, соответствующая равновесию потоков нагрева и охлаждения $T_W \sim 1$ эВ [5]. Далее происходит ионизация под воздействием внешней плазмы [5].

Для условий импульсного воздействия плазмы в виде ELM (Edge Localized Mode) [18], имеющей энергию частиц E_0 порядка 1 кэВ и плотность плазмы n_{pl} порядка 10^{14} см⁻³, плотность n_1 составит более 10^{18} см⁻³, что соответствует нижней границе плотности плазмы, достаточной для инициирования взрывоэмиссионных всплесков, согласно работам [22, 23]. Однако также наблюдается и спонтанное инициирование — без триггера в виде потока энергии.

2.1. Спонтанное инициирование

Уже в первой работе по экспериментальному исследованию взаимодействия плазмы с такой наноструктурированной вольфрамовой поверхностью в крупной термоядерной установке — стеллараторе LHD (Large Helical Device) [12] — было получено инициирование дуговых разрядов в стационарной плазме с плотностью на уровне 10^{12} см⁻³ и энергией падающих на поверхность ионов 100–200 эВ в области дивертора. Поток энергии q и соответствующая плотность n_1 (выражение (2)) оказываются меньше на несколько порядков, чем в случае импульсного воздействия плазмы во время ELM (которых не возникает в плазме, удерживаемой в магнитной конфигурации стелларатора), а именно порядка 10^{15} см⁻³.

Аналогичные параметры плазмы (плотность на уровне 10^{12} см⁻³) были и в последующих экспериментах в линейном симуляторе NAGDIS-II [13, 14],

где отдельно исследовалось спонтанное инициирование. При этом основное влияние на инициирование оказывало увеличение пристеночного потенциала примерно с 300 В до 400–500 В [13]. Очевидно, что соответствующее этому увеличение потока энергии и соответствующей плотности n_1 всего в 1.5–2 раза (см. (2)) не может заведомо объяснить инициирование взрывоэмиссионных всплесков.

Отметим, кроме того, что рассмотренная «энергетическая» модель [5] не учитывает, во-первых, большое количество газа в волокнах, а во-вторых, снижение средней энергии связи атомов вольфрама в наноструктуре, так как соответствующие количественные исследования были проведены позднее.

2.2. Содержание гелия

В результате прямых экспериментальных измерений было определено количество гелия, содержащегося в наноструктуре волокон [24]. Отношение частиц составило $\text{He}/\text{W} = 13 \pm 4\%$. Учитывая, что плотность вольфрама в нормальных условиях составляет $n_W \approx 6 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$, средняя по нановолокнам концентрация гелия составит порядка $\langle n_{\text{He}} \rangle \sim 10^{22} \text{ см}^{-3}$. Освобождение такого количества газа при масштабном разрушении волокон может существенно повлиять на параметры плазмы. Хотя потенциал ионизации гелия ($I_{\text{He}+1} = 25 \text{ эВ}$) существенно выше, чем вольфрама ($I_{\text{W}+1} = 7.98 \text{ эВ}$), что приводит к преимущественному формированию металлической плазмы, а не газовой, взрывы нанометровых пузырей с примерно твердотельной плотностью газа в них, n_{He} на уровне 10^{23} см^{-3} [24], будут приводить к заполнению объема структуры нановолокон газом высокой концентрации.

Для кубического расширения $nr^3 = \text{const}$ и начального размера пузыря 1 нм получим уменьшение концентрации газа с увеличением расстояния:

$$n_{\text{He}}(r) = 100/r^3,$$

что дает высокую концентрацию 10^{20} см^{-3} и 10^{17} см^{-3} на удалении 10 нм и 100 нм, соответствующем расстоянию между соседними нановолокнами.

2.3. Энергия связи

На основе модели, связывающей средний заряд ионов взрывоэмиссионной плазмы вакуумного дугового разряда и энергии связи атомов металла катода [25, 26], а также экспериментальных результатов по заряду ионов плазмы вакуумной дуги, горячей на слоях вольфрамовых нановолокон [27], была

оценена средняя энергия связи для такой наноструктуры [17]:

$$\langle E_{coh} \rangle = 10 \text{ эВ} \langle n \rangle / n_W, \quad (3)$$

где $\langle n \rangle$ — средняя концентрация атомов в волокнах, составляющая от нескольких сотых до десятых долей от концентрации вольфрама в нормальных условиях (n_W).

Наименьшее измеренное значение $\langle n \rangle / n_W$ составило около 5% [28], что дает для средней энергии связи $\langle E_{coh} \rangle \approx 0.5 \text{ эВ}$. Учет этой величины в уравнении (2) увеличит оцениваемое значение плотности n_1 в $E_{coh} / \langle E_{coh} \rangle = 18$ раз, до уровня 10^{16} см^{-3} .

Данные особенности связаны с «тонкой структурой» рассматриваемой гетерофазной системы нановолокон, свойства которой требуется корректно учесть в задаче о формировании плазмы.

3. ПЕРЕДАЧА ЭНЕРГИИ В СТОЛКНОВЕНИЯХ

3.1. Столкновения гелий–вольфрам

Исходя из отношения атомных масс вольфрама и гелия

$$M_W / M_{\text{He}} \approx 46,$$

можно видеть, что в каждом соударении атомам вольфрама от гелия передается только небольшая часть энергии, и полная передача произойдет за число соударений порядка M_W / M_{He} .

При энергии $E_0 = 50 \text{ эВ}$, превышающей пороговое значение для инициирования роста волокон [2], величина передаваемой атомам вольфрама энергии составляет

$$E_0 M_{\text{He}} / M_W \sim 1 \text{ эВ},$$

что достаточно для нагрева волокон и может быть существенным для их роста. При повышении энергии ионов гелия до 500 эВ переданная атомам вольфрама энергия может достигать

$$E_0 M_{\text{He}} / M_W \sim 10 \text{ эВ},$$

что сравнимо с энергией связи вольфрама в нормальных условиях ($E_{coh} = 9 \text{ эВ}$) и может быть достаточным для существенного распыления нановолокон. Как отмечалось в [13], распыление может иметь значение для спонтанного инициирования при повышении потенциала.

При этом общая длина траектории L составит

$$L \sim a M_W / M_{\text{He}} \approx 14 \text{ нм}$$

(где $a = 3.165 \text{ \AA}$ — период кристаллической решетки

вольфрама), что по порядку величины совпадает с поперечным размером нановолокон — десятки нанометров [1].

Для оценки глубины пробега нужно учесть рассеяние на большие углы при соударении частиц сильно различающихся масс. Однако более важно наличие в волокнах большого количества ранее внедренного гелия.

3.2. Столкновения гелий–гелий

При средней концентрации $\langle n_{\text{He}} \rangle \sim 10^{22} \text{ см}^{-3}$ столкновения He–He будут достаточно частыми, но еще более важно, что в таких соударениях из-за равенства масс может произойти передача большой части или всей энергии. При этом в процессе роста нановолокон атомы гелия накапливаются в вольфраме и объединяются в нанопузыри с концентрацией газа порядка твердотельной $n \sim 10^{23} \text{ см}^{-3}$. Падающий атом гелия в таком пузыре может потерять всю энергию за одно столкновение, при этом столкновения происходят с частотой

$$nv\sigma \sim 10^{14} \text{ с}^{-1},$$

где $v \sim 10^7 \text{ см/с}$ — скорость падающего атома гелия, $\sigma \approx 10^{-16} \text{ см}^2$ — сечение столкновений [29]. Более подробные результаты можно получить на основе работы [30]. Оценим время релаксации (τ_{He}) атома в бесконечном объеме, заполненном атома-

ми гелия при температуре, равной 1000 К, согласно уравнениям [30]

$$\tau_{\text{He}} = \int_0^N \frac{dN'}{n\sigma(E(N')/2)v(E(N'))}, \quad (4a)$$

$$N(E_i, E_f) = \int_{E_f}^{E_i} \frac{dE'}{\langle \delta E' \rangle}, \quad (4b)$$

$$\langle \delta E \rangle = \frac{E}{2} \int_0^\pi (1 - \cos \theta) \rho(\varepsilon, \theta) d\theta, \quad (4c)$$

$$\rho(\varepsilon, \theta) = \frac{2\pi \sin \theta}{\sigma(\varepsilon)} \frac{d\sigma(\varepsilon, \theta)}{d\Omega}, \quad (4d)$$

где N — среднее число столкновений, необходимых для уменьшения энергии быстрого атома от начального значения E_i до конечного значения E_f , $v(E)$ — скорость быстрого атома, $\langle \delta E \rangle$ — средняя доля энергии, передаваемая при упругом соударении между атомами гелия, θ — угол рассеяния в системе центра масс, ε — энергия столкновения частиц в системе центра масс, $\rho(\varepsilon, \theta)$ — нормированное распределение плотности вероятности углов рассеяния, $\sigma(\varepsilon)$ и $d\sigma(\varepsilon, \theta)/d\Omega$ — полное и дифференциальное сечение рассеяния соответственно.

Используя выражения для полного и дифференциального сечений рассеяния из [30], полученные путем аппроксимации результатов квантовомеханических расчетов, и численно интегрируя уравнения (4), можно оценить время термализации быстрого атома с энергией $E = 100\text{--}500 \text{ эВ}$ в газе с температурой $T = 1000 \text{ К}$ и концентрацией $n = \alpha n_W$. Полученное время релаксации быстрого атома гелия составляет величину порядка 10–100 фс (см. рис. 1).

Однако характерная длина пробега до столкновения

$$\lambda \sim 1/n\sigma \sim 1 \text{ нм} \quad (5)$$

сравнима с характерными размерами нанопузырей [31]. Это означает, что требуется рассматривать гетерофазную систему. Подробные результаты можно получить на основе атомистического моделирования [32–34].

Отметим, что сам нагрев поверхности до 900–2000 К, необходимый для роста нановолокон, происходит рассматриваемым потоком ионов из плазмы. При этом скорость релаксации энергии в такой гетерофазной системе будет определять, происходит ли «равномерный» нагрев или энергия локализуется в пузырье, что может приводить к его «взрыву».

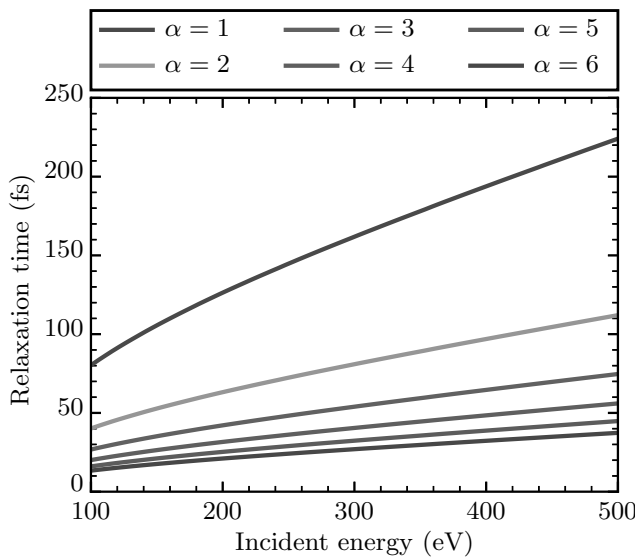


Рис. 1. Зависимости времени релаксации энергии быстрого атома гелия в бесконечном объеме, заполненном гелием при температуре равной 1000 К и различных значениях концентрации

Проведем численное атомистическое моделирование методом молекулярной динамики процесса взаимодействия атома гелия повышенной энергии (сотни электронвольт) с наноструктурой вольфрама, содержащей гелиевый нанопузырь с твердотельной плотностью газа.

4. МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

4.1. Методика

Расчеты методом молекулярной динамики проводились в программном пакете LAMMPS [35, 36]. Взаимодействие между атомами вольфрама описывалось ЕАМ-потенциалом Финниса – Синклера [37, 38] с модификациями для учета близкого взаимодействия от Акленда и Тетфорда [39] и ультраблизкого взаимодействия от Джуслина и Вирта [40]. Взаимодействие вольфрам–гелий определялось парным потенциалом Джуслина и Вирта [40], взаимодействие гелий–гелий — парным потенциалом Бэка [41, 42] с модификацией для малых расстояний от Моришиты и других [43].

Данный набор потенциалов межатомного взаимодействия позволяет достаточно точно воспроизвести результаты *ab initio* расчетов [40] и часто применяется как для анализа динамики растворенного гелия в вольфраме при фиксированной температуре [32, 33, 44–46], так и для моделирования кумулятивного облучения поверхности вольфрама атомами гелия с начальной энергией в диапазоне 100–500 эВ [47–49]. Важно заметить, что неупругие потери энергии быстрых частиц при их торможении в объеме материала не учитываются явным образом при моделировании методом молекулярной динамики. По данным программного пакета TRIM [50] доля неупругих потерь при торможении атома гелия с начальной энергией равной 500 эВ составляет $\approx 60\%$ в вольфраме и $\approx 14\%$ в гелии. С учетом этого времени релаксации энергии гелиевых пузырей, оцениваемые в работе, представляют из себя верхнюю границу возможных значений.

Геометрия представляла из себя модельную поверхность вольфрама с размерами $40a \times 40a \times 50a$ и ориентацией (100) при температуре $T = 1000$ К (рис. 2), $a = 3.183$ Å. Вдоль осей x и y были заданы периодические граничные условия, тогда как вдоль оси z было разрешено свободное движение атомов. Четыре нижних атомных слоя были «заморожены» (скорость равна нулю) для предотвращения миграции геометрии. Над атомами вольфрама дополнительно задавалась пустая область толщиной $10a$ для имитации свободной поверхности.

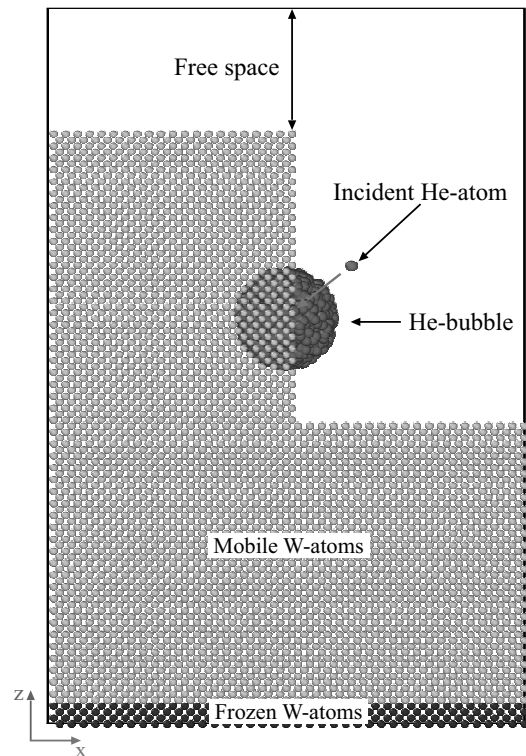


Рис. 2. Начальная геометрия, использованная при моделировании взаимодействия быстрого атома гелия с пузырем гелия. Серые сферы — подвижные атомы вольфрама, черные сферы — «замороженные» атомы вольфрама, зеленые сферы — атомы пузыря гелия, красная сфера — налетающий атом гелия. Красная стрелка показывает направление начальной скорости налетающего атома. Часть подвижных атомов вольфрама скрыта для наглядности

Создание пузыря гелия осуществлялось в два этапа. Сначала из идеальной решетки вольфрама удалялись атомы, лежащие в сфере радиусом r с центром в плоскости, параллельной поверхности. Глубина центра симметрии сферы подбиралась таким образом, чтобы задаваемая конфигурация оставалась устойчивой во время термализации при $T = 1000$ К. Затем в вырезанной сфере случайным образом размещалось заданное количество атомов гелия. Были рассмотрены пузыри гелия с радиусами от $1a$ до $4a$ (от 3.183 Å до 12.732 Å) со значением заселенности пузырей ($\varphi = N_{\text{He}}/N_V$ — отношение числа атомов гелия N_{He} к числу вакансий N_V в пузыре гелия) равным 2, выбранным на основе результатов многомасштабного моделирования кумулятивного облучения поверхности вольфрама гелием [32, 33]. Соответствующая концентрация $n = 2\varphi/a^3 \approx 10^{23}$ см $^{-3}$. Затем в течение 500 пс проводилась термализация системы при помощи термостата Ноэе – Гувера [51, 52].

Для моделирования взаимодействия быстрого атома с пузырем пробный атом гелия помещался на поверхности сферы радиусом $(r + a)$ с начальной энергией E_0 и вектором скорости по направлению к центру сферы (рис. 2). При таком подходе исключаются модельные случаи отражения бомбардирующих атомов от поверхности и термализации быстрого атома в вольфраме, не попавшего в пузырь, которые наблюдались бы в случае моделирования облучения участка поверхности вольфрама, содержащего пузырь гелия. Начальная энергия была фиксирована и лежала в диапазоне от 100 до 500 эВ. Для получения более детальных результатов в ходе моделирования был использован переменный временной шаг из диапазона 0.01–1 фс. Величина временного шага обновлялась каждые 10 итераций и подбиралась так, чтобы ни один атом не сдвигался более чем на 0.05 Å за одну итерацию. Расчет завершался, когда величина суммарной кинетической энергии пузыря уменьшалась до 1.025 от начального уровня. В процессе моделирования взаимодействия термостат выключался, а полная энергия системы фиксировалась.

Визуализация атомных конфигураций осуществлялась при помощи бесплатной версии программного пакета OVITO [53]. Все псевдослучайные числа, использованные в ходе моделирования, генерировались на основе алгоритма «вихрь Мерсенна» [54], реализованного в Python-модуле «random». Помимо этого, проводилась оценка давления гелиевых пузырей (P_{bubble}) на основе вириального соотношения

$$P_{bubble} = \frac{1}{3V} \sum_i \left(m_i v_i^2 + \frac{1}{2} \sum_j \mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{F}_{ij} \right), \quad (6)$$

где i — порядковый номер атома гелия в пузыре, j — порядковый номер соседнего атома от i -го атома, m_i — масса i -го атома, v_i — скорость i -го атома, $\mathbf{F}_{ij}$ — вектор силы, действующей на i -й атом со стороны j -го атома, $\mathbf{r}_{ij}$ — радиус-вектор от j -го атома до i -го, V — объем гелиевого пузыря, который определялся на основе метода диаграммы Вороного, реализованного в LAMMPS.

4.2. Время релаксации энергии

Было проведено порядка 10^3 расчетов для каждой конфигурации (r, E_0) , когда случайным образом задавалось положение налетающего атома гелия и атомов гелия в пузыре при предварительной термализации. Пример временных эволюций кинетической энергии быстрого атома и суммарной

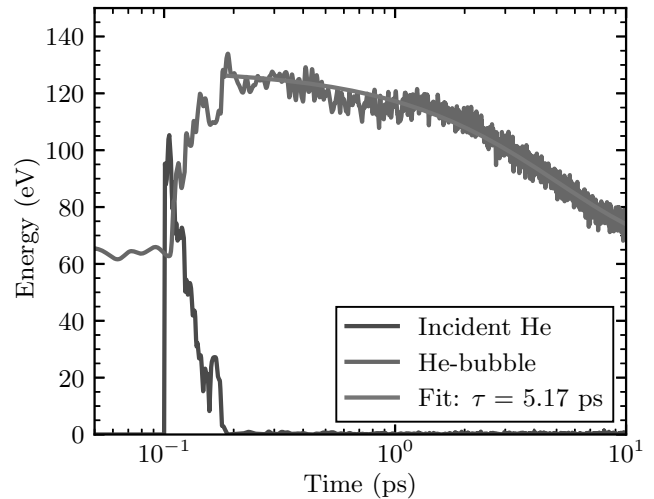


Рис. 3. Временные зависимости энергий гелиевого пузыря ($r = 3a$, $N_V = 245$, $N_{He} = 490$) и налетающего атома гелия ($E_0 = 100$ эВ). Быстрый атом гелия вводится в систему на 0.1 пс

кинетической энергии гелиевого пузыря ($r = 3a$, $N_V = 245$, $N_{He} = 490$) приведен на рис. 3.

Отметим, что термализация быстрого атома в данном гелиевом пузыре, окруженном атомами вольфрама, происходит за время порядка 0.1 пс, что в 2.5 раза больше соответствующего значения, полученного на основе выражений (4). Важно заметить, что аппроксимационные аналитические выражения для полного и дифференциального сечений рассеяния, приведенные в [30], имеют наибольшую погрешность для случая столкновений гелий–гелий. Тем не менее полученные времена близки по величине, что подтверждает эффективность передачи энергии от быстрого атома гелия к атомам пузыря гелия.

Для оценки характерного времени релаксации энергии гелиевых пузырей каждая временная зависимость полной энергии пузыря аппроксимировалась выражением

$$E(t) = A + B \exp\{(-t/\tau)\} \quad (7)$$

(красная линия на рис. 3). Затем для каждой серии моделирования определялась плотность распределения характерного времени τ методом аппроксимации Парзена–Розенблатта [55, 56]. На рис. 4 приведены плотности распределения характерного времени релаксации суммарной энергии гелиевого пузыря в зависимости от его радиуса (a) и начальной энергии влетающего атома (b). Видно, что характерные времена релаксации после влета быстрого атома τ составляют единицы пикосекунд, при этом полная релаксация энергии достигается за вре-

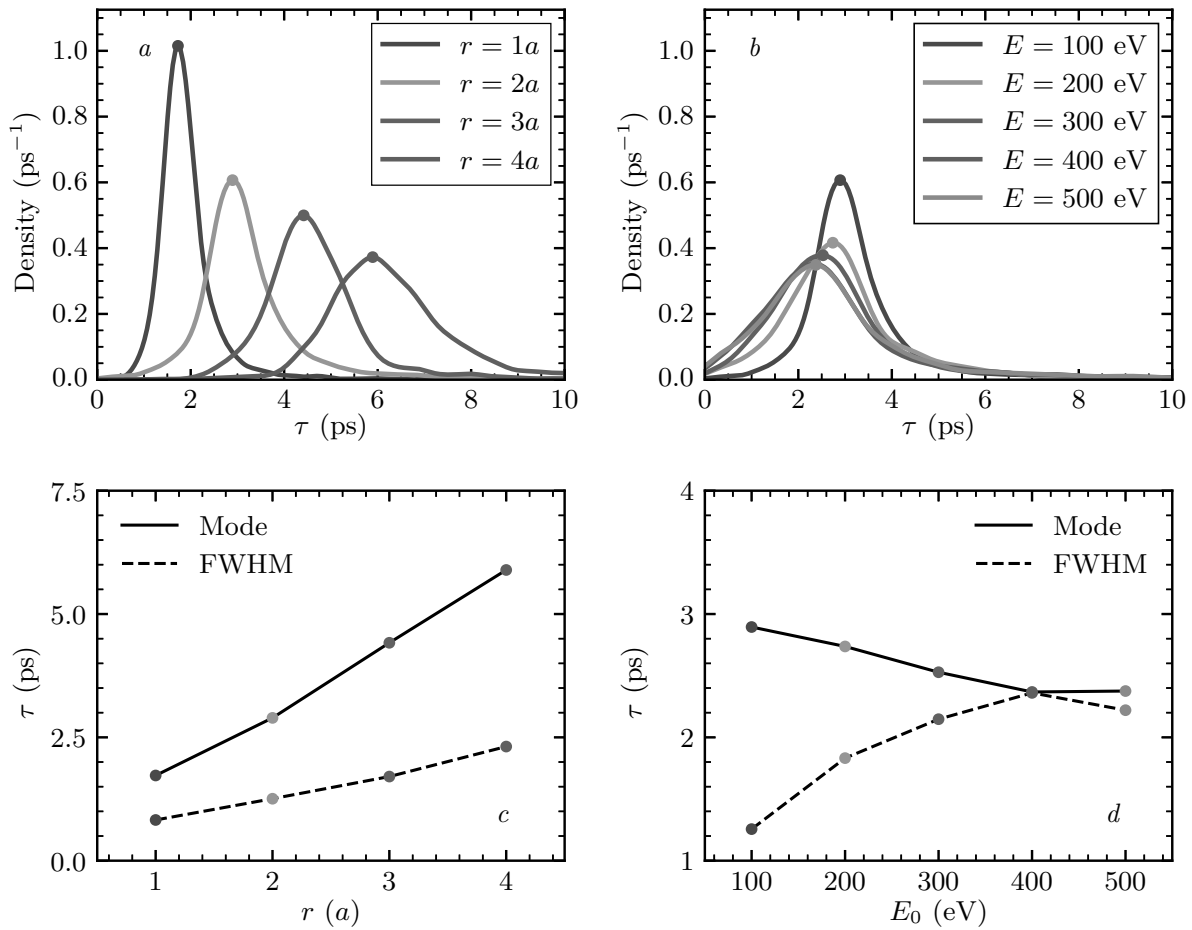


Рис. 4. Плотность распределения характерного времени релаксации энергии гелиевого пузыря после влета в него быстрого атома гелия в зависимости от радиуса пузыря (a) при $E_0 = 100$ эВ и в зависимости от начальной энергии налетающего атома (b) при $r = 2a$. c, d — соответствующие зависимости моды и ПШПВ-распределений

мая порядка 3τ , что согласуется с экспоненциальной зависимостью.

Из приведенных на рис. 4 зависимостей видно, что с увеличением размера пузыря примерно линейно растет среднее время релаксации $\langle\tau\rangle$:

$$\langle\tau\rangle [\text{пс}] = 0.23 + 1.40(r/a), \quad (8)$$

а также полная ширина на полувысоте $\delta\tau$:

$$\delta\tau [\text{пс}] = 0.29 + 0.49(r/a). \quad (9)$$

Также можно видеть, что с увеличением начальной энергии E_0 среднее время релаксации линейно снижается, а ширина распределения растет.

Таким образом, энергия падающего атома гелия действительно может эффективно передаваться ансамблю атомов пузыря. За пикосекундные времена для нанометровых размеров пузырей происходит релаксация и передача энергии от газа к атомам вольфрама.

5. ОБСУЖДЕНИЕ

Оценим время попадания нового атома гелия в пузырь τ_{impl} . Характерный поток ионов из пристеночной плазмы Γ_{pl} в условиях экспериментов [12–14] составляет $\Gamma_{pl} \sim 10^{19} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$. Поперечный размер нанопузыря гелия — «сечение столкновений» — $\sigma_{bubble} = \pi r^2 \sim 10^{-14} \text{ см}^2$. Тогда для характерного времени получим величину

$$\tau_{impl} \sim (\Gamma_{pl} \sigma_{bubble})^{-1} = 10 \text{ мкс}. \quad (10)$$

Очевидно, что τ_{impl} существенно превосходит полученные времена релаксации энергии, составляющие единицы пикосекунд. Таким образом, неравновесное состояние с повышенной энергией в газе нанопузыря будет наблюдаться только в течение единиц пикосекунд после падения быстрой частицы.

В недавней работе [57] исследовались процессы «взрывного» разрушения приповерхностных нанопузырей гелия при высоком давлении газа в них. На основе результатов моделирования методом молекулярной динамики были получены уравнения состо-

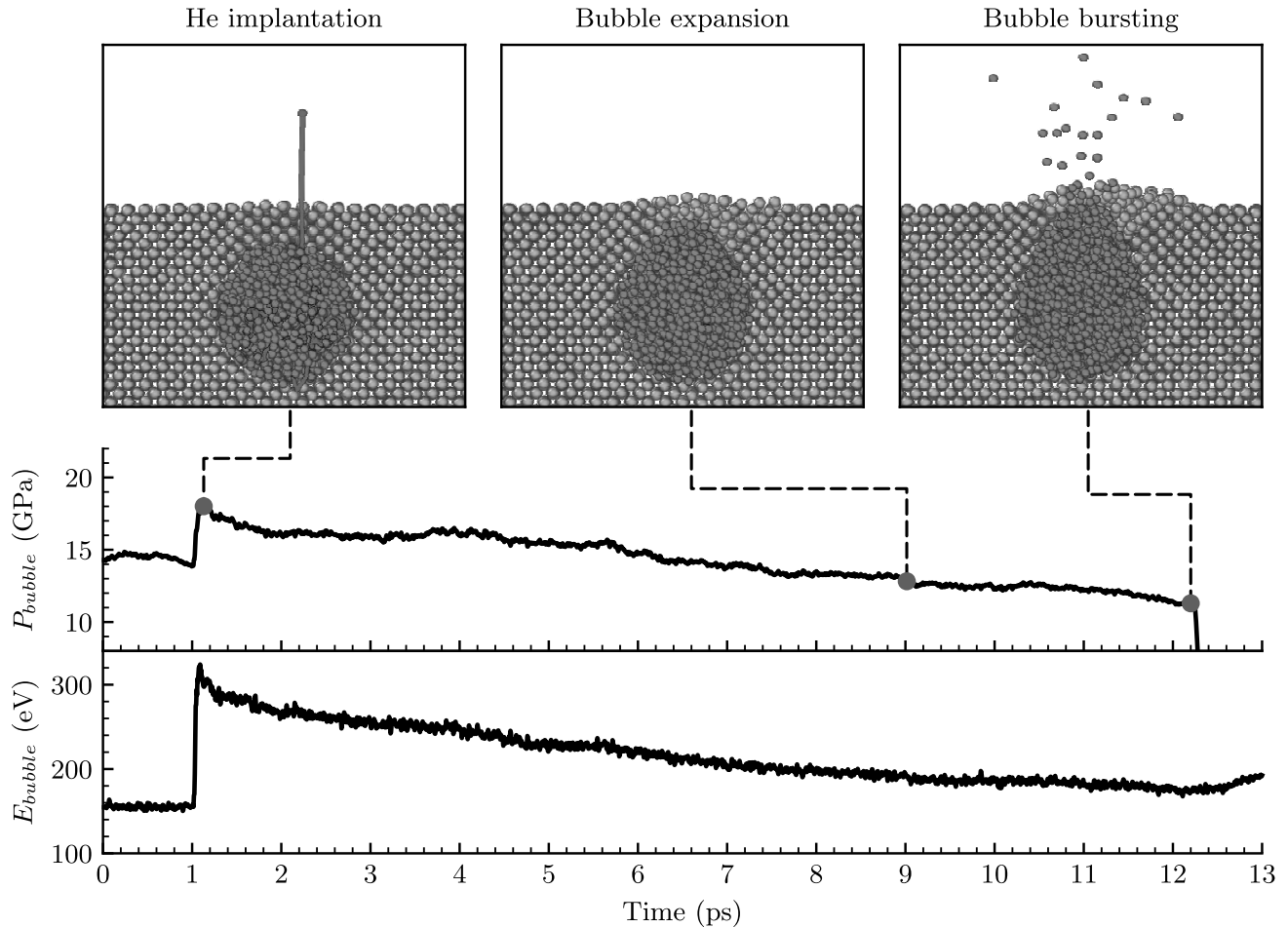


Рис. 5. Временные зависимости давления (P_{bubble}) и суммарной кинетической энергии (E_{bubble}) гелиевого пузыря ($r = 4a$, $N_{He} = 1100$, $N_V = 537$) во время его разрушения, вызванного внедрением атома гелия повышенной энергии ($E_0 = 250$ эВ)

яния для гелиевых пузырей, удерживаемых в вольфраме, а также определены критические параметры (глубина залегания пузырей относительно поверхности h и их заселенность φ), при которых происходит их взрыв. При этом рассматривалось равновесное распределение температуры — «медленные» взрывы. В этом случае разрушение пузырей при фиксированной температуре происходит за счет достижения критического числа атомов (концентрации) гелия в пузыре. В нашем случае можно рассмотреть «быстрые» взрывы пузырей — когда сообщенная пузырю дополнительная энергия от падающей частицы не релаксирует, что приводит к кратковременному повышению кинетического давления гелиевого пузыря (первое слагаемое в правой части уравнения (6)) и, как следствие, его взрыву. А именно, рассмотрим «быстрые» взрывы — за времена менее $3\tau \sim 10$ пс (уравнение (8)). Отметим, что непосредственно сама скорость разрушения будет определяться температурой вольфрама и геометрией и может быть сравнима для обоих случаев.

В наших расчетах (см. геометрию на рис. 2) мы задавали глубокое залегание пузыря, чтобы получить стационарное решение. Очевидно, что взрываться будут пузыри, залегающие неглубоко от поверхности. Рассмотрим для примера именно такой случай, изображенный на рис. 5, где в гелиевый пузырь ($r = 4a$, $N_{He} = 1100$, $N_V = 537$, $\varphi \approx 2$), изначально находящийся на глубине $6a$ при температуре 1000 К, влетает быстрый атом гелия с начальной энергией 250 эВ.

Видно, что, действительно, за пикосекундные времена после падения быстрого атома в приповерхностный пузырь происходит его взрывное разрушение и высвобождение большого количества захваченного гелия. Напомним, что концентрация гелия в пузырях на уровне 10^{23} см^{-3} приблизительно на 3.5 порядка превышает концентрацию газа атмосферного давления ($2.7 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$) и на 10 порядков — концентрацию газа, соответствующую рабочему давлению в экспериментах по росту нановолокон и спонтанному инициированию [12–14].

При расширении газа в пустоту скорость границы достигает [58]

$$u_{max} = \sqrt{\frac{4\gamma}{\gamma-1} \frac{E_{bubble}}{M_{He}N_{He}}}, \quad (11)$$

что для параметров на рис. 5 дает $6.2 \cdot 10^5$ см/с (показатель адиабаты $\gamma = 5/3$). Расстояние до соседних нановолокон (десятки нанометров) будет пройдено за порядка 10 пс. Передача механического импульса может быть существенной для разрушения поверхностных пузырей в соседних нановолокнах (см. [17]).

Также следует отметить, что полная энергия атомов гелия в наноразмерном пузыре E_{bubble} , находящемся в равновесии с вольфрамом, имеющим температуру в диапазоне 900–2000 К, составляет порядка 100 эВ (см. рис. 3 и 5). Таким образом, энергия падающих частиц гелия E_0 на уровне десятков электронвольт, соответствующая росту нановолокон (E_{growth}), недостаточна для существенного перегрева пузыря:

$$E_{growth} < E_{bubble} < E_{si}. \quad (12)$$

Выделяемая энергия E_0 рассеивается и обеспечивает нагрев всей наноструктуры. Напротив, повышения энергии E_0 до сотен электронвольт ($E_0 = E_{si}$) достаточно для заметного увеличения энергии ансамбля частиц в пузыре на пикосекундную длительность — достаточную для «быстрого» взрыва пузырей у поверхности (рис. 5). Данная энергия E_{si} соответствует повышению пристеночного потенциала до сотен электронвольт, $E_{si} = eU_{si}$ — когда спонтанно инициируются пробои.

Подчеркнем, что для высвобождения большого количества вольфрама и формирования металлической плазмы необходим большой энерговклад, который может быть обеспечен не рассматривавшимся в данной работе джоулевым энерговыделением при протекании тока.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрены процессы образования плазмы из нановолокон вольфрама, содержащих пузыри гелия, под воздействием потока энергии и частиц из гелиевой плазмы. Условия соответствуют экспериментам с повышенной энергией падающих частиц — повышенного до сотен вольт пристеночного потенциала, когда наблюдается спонтанное инициирование всплесков взрывной электронной эмиссии. Показано, что для развития моделей инициирования под внешним воздействием потока энергии и частиц требуется учет гетерофазной структуры нановолокон.

Методами молекулярной динамики проведено атомистическое моделирование взаимодействия налетающего атома гелия повышенной энергии (сотни электронвольт) с ансамблем атомов гелия в наноразмерном пузыре с твердотельной концентрацией газа, удерживаемом в приповерхностном слое вольфрама. Получено время релаксации энергии в гетерофазной системе нанопузыря в вольфраме, составляющее единицы пикосекунд.

Также было продемонстрировано, что при энергии падающих частиц на уровне сотен электронвольт возможен перегрев приповерхностных нанопузырей, который приводит к их взрыву за времена порядка 10 пс. Такая энергия сопоставима с полной энергией частиц нанопузыря, и при таком пристеночном потенциале наблюдаются спонтанные инициирования всплесков взрывной электронной эмиссии.

Благодарности. Молекулярнодинамические расчеты проводились при использовании ресурсов высокопроизводительного вычислительного центра НИЯУ МИФИ.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 22-12-00274).

ЛИТЕРАТУРА

1. S. Kajita, N. Yoshida, and N. Ohno, Nucl. Mater. Energy **25**, 100828 (2020).
2. J. Wright, Tungsten **4**, 184 (2022).
3. K. D. Hammond, Mater. Res. Express **4**, 104002 (2017).
4. S. Kajita, S. Takamura, and N. Ohno, Nucl. Fusion **49**, 032002 (2009).
5. S. A. Barengolts, G. A. Mesyats, and M. M. Tsventoukh, IEEE Trans. Plasma Sci. **39**, 1900 (2011).
6. D. Hwangbo, S. Kawaguchi, S. Kajita, and N. Ohno, Nucl. Mater. Energy **12**, 386 (2017).
7. S. Kajita, W. Sakaguchi, N. Ohno et al., Nucl. Fusion **49**, 095005 (2009).
8. Y. Martynenko and M. Nagel', Plasma Phys. Rep. **38**, 996 (2012).
9. M. Baldwin and R. Doerner, Nucl. Fusion **48**, 035001 (2008).
10. S. Krashenninnikov, Phys. Scripta T **145**, 014040 (2011).
11. S. Kajita, N. Yoshida, R. Yoshihara et al., J. Nucl. Mater. **418**, 152 (2011).

12. M. Tokitani, S. Kajita, S. Masuzaki et al., Nucl. Fusion **51**, 102001 (2011).
13. S. Kajita, Y. Noiri, and N. Ohno, Phys. Scripta **90**, 095604 (2015).
14. R. Zhang, S. Kajita, D. Hwangbo et al., Nucl. Mater. Energy **31**, 101178 (2022).
15. G. A. Mesyats, J. Nucl. Mater. **618**, 128 (1984).
16. S. A. Barengolts, G. A. Mesyats, and M. M. Tsventoukh, Nucl. Fusion **50**, 125004 (2010).
17. M. M. Tsventoukh, Phys. Plasmas **30**, 092511 (2023).
18. A. Loarte, B. Lipschultz, A. S. Kukushkin et al., Nucl. Fusion **47**, S203 (2007).
19. V. S. Mikhailov, P. Yu. Babenko, A. P. Shergin et al., J. Exp. Theor. Phys. **137**, 413 (2023).
20. С. А. Баренгольц, Г. А. Месяц, М. М. Цвентух, ЖЭТФ **134**, 1213 (2008) [S. A. Barengolts, G. A. Mesyats, and M. M. Tsventoukh, JETP **107**, 1039 (2008)].
21. K. H. Lin, S. L. Wang, C. Chen, and S. P. Ju, RSC Advances **4** (46), 24286 (2014).
22. D. L. Shmelev and S. A. Barengolts, IEEE Trans. Plasma Sci. **41**, 1959 (2013), <https://doi.org/10.1109/TPS.2013.2245347>.
23. M. M. Tsventoukh, Phys. Plasmas **25**, 053504 (2018), <https://doi.org/10.1063/1.4999377>.
24. Yu. Gasparyan, V. Efimov, and K. Bystrov, Nucl. Fusion **56**, 054002 (2016).
25. M. M. Tsventoukh, Phys. Plasmas **28**, 024501 (2021), <https://doi.org/10.1063/5.0034814>.
26. M. M. Tsventoukh, J. Phys. D: Appl. Phys. **55**, 355204 (2022), <https://doi.org/10.1088/1361-6463/ac77c8>.
27. S. A. Barengolts, D. Hwangbo, S. Kajita et al., Nucl. Fusion **60**, 044001 (2020), <https://doi.org/10.1088/1741-4326/ab73c3>.
28. D. Nishijima, M. Baldwin, R. Doerner, and J. Yu, J. Nucl. Mater. **415**(1), S96 (2011), <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2010.12.017>.
29. D. Ruzic and S. Cohen, J. Chem. Phys. **83**, 5527 (1985).
30. N. R. Lewkow, V. Kharchenko, and P. Zhang, Astrophys. J. **756**, 57 (2012).
31. S. Kajita, N. Yoshida, R. Yoshihara et al., J. Nucl. Mater. **418**, 152 (2011).
32. K. Hammond, S. Blondel, L. Hu et al., Acta Mater. **144**, 561 (2018).
33. K. Hammond, D. Maroudas, and B. Wirth, Sci. Rep. **10**, 2192 (2020).
34. E. A. Lobashev, A. S. Antropov, and V. V. Stegailov, JETP **136**, 174 (2023).
35. A. Thompson, H. Aktulga, R. Berger et al., Comput. Phys. Commun. **271**, 108171 (2022).
36. S. J. Plimpton, Comput. Phys. **117**, 1 (1995).
37. M. Finnis and J. Sinclair, Philos. Mag. A **50**, 45 (1984).
38. M. Finnis and J. Sinclair, Philos. Mag. A **53**, 161 (1986).
39. G. Ackland and R. Thetford, Philos. Mag. A **56**, 15 (1987).
40. N. Juslin and B. Wirth, J. Nucl. Mater. **432**, 61 (2013).
41. D. Beck, Mol. Phys. **14**, 311 (1968).
42. D. Beck, Mol. Phys. **14**, 332 (1968).
43. K. Morishita, R. Sugano, B. Wirth, and T. Diaz de la Rubia, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. Sect. B: Beam Interact. Mater. Atoms **202**, 76 (2003).
44. L. Hu, K. D. Hammond, B. D. Wirth, and D. Maroudas, Surf. Sci. **626**, L21 (2014).
45. S. Blondel, D. E. Bernholdt, K. D. Hammond, and B. D. Wirth, Nucl. Fusion **59**, 029501 (2019).
46. A. Weerasinghe, L. Hun, K. D. Hammond et al., J. Appl. Phys. **128**, 165109 (2020).
47. L. Pentecoste, P. Brault, A.-L. Thomann et al., J. Nucl. Mater. **470**, 44 (2016).
48. L. Pentecoste, A.-L. Thomann, P. Brault et al., Acta Mater. **141**, 47 (2017).
49. F. Ferroni, K. D. Hammond, and B. D. Wirth, J. Nucl. Mater. **458**, 419 (2015).
50. J. F. Ziegler, M. D. Ziegler, and J. P. Biersack, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. Sect. B: Beam Interact. Mater. Atoms **268**, 1818 (2010).
51. S. Nosé, J. Chem. Phys. **81**, 511 (1984).
52. W. Hoover, Phys. Rev. A **31**, 1695 (1985).
53. A. Stukowski, Model. Simul. Mater. Sci. Eng. **18**, 015012 (2010).
54. M. Matsumoto and T. Nishimura, ACM Trans. Model. Comput. Simul. **8**, 3 (1998).
55. M. Rosenblatt, Ann. Math. Stat. **27**, 832 (1956).
56. E. Parzen, Ann. Math. Stat. **33**, 1065 (1962).
57. W. Setyawan, D. Dasgupta, S. Blondel et al., Sci. Rep. **13**, 9601 (2023), <https://doi.org/10.1038/s41598-023-35803-3>.
58. Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер, *Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений*, Физматгиз, Москва (1963), с. 91.

К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

В ЖЭТФ публикуются статьи, содержащие изложение оригинальных научных результатов, не опубликованных и не предназначенных к публикации в другом месте. В отдельных случаях по заказу редколлегии публикуются актуальные статьи обзорного характера.

Редакция ЖЭТФ принимает статьи на русском и на английском языках.

Редакция рекомендует направлять статьи в электронном виде по электронной почте или загружать их в режиме «on-line» через сайт журнала <http://jetp.ras.ru/>

Издательство требует от авторов при публикации статьи заключения договора о передаче авторских прав. Заполненные и подписанные договоры (форма договоров отправляется авторам ВМЕСТЕ С КОРРЕКТУРОЙ) могут быть представлены лично или по электронной почте в отсканированном виде (PDF файлы).

По всем вопросам можно обращаться в редакцию.

Адрес: 117334, Москва, ул. Косыгина, д. 2, Редакция ЖЭТФ

E-mail: jetp@kapitza.ras.ru Телефон: +7 (499) 137 56 22

К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

Редакция ЖЭТФ просит авторов при направлении статей в печать руководствоваться приведенными ниже правилами.

1. В ЖЭТФ публикуются статьи, содержащие изложение оригинальных научных результатов, не опубликованных и не предназначенных к публикации в другом месте. В отдельных случаях по заказу редколлегии публикуются актуальные статьи обзорного характера.

2. Статьи должны быть изложены с предельной краткостью, совместимой с ясностью изложения, и окончательно обработаны. Следует избегать повторения данных таблиц или графиков в тексте статьи, а также представления численных результатов в виде таблиц и графиков одновременно. Не следует злоупотреблять введением новых аббревиатур в дополнение к общепринятым, таким как ЯМР, УФ и т. д.

3. К статье необходимо прилагать короткую аннотацию, в которой должны быть четко сформулированы цель и результаты работ (аннотация и раздел «Выводы» не должны дублировать друг друга).

4. Редакция принимает статьи:

- а) по электронной почте по адресу JETP@kapitza.ras.ru;
- б) в «on-line» режиме на веб-странице журнала (www.jetp.ras.ru);

В электронном варианте текст должен быть представлен в формате L^AT_EX или Word, рисунки — в формате EncapsulatedPostScript (*.eps), каждый рисунок отдельным файлом.

5. Подстрочные примечания должны иметь сплошную нумерацию по всей статье. Цитируемая литература должна даваться не в виде подстрочных примечаний, а общим списком в конце статьи с указанием в тексте статьи ссылки порядковой цифрой в прямых скобках (например, [1]). Литература дается в порядке упоминания в статье. Порядок оформления литературы виден из следующих примеров:

1. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука,

Москва (1984), с. 1.

2. А. М. Сергеев, Р. И. Чернова, А. Я. Сергиенко, ФТТ **30**, 835 (1988).
3. R. Brewer, J. M. Faber, C. N. Malleson et al., Phys. Rev. A **18**, 1632 (1978).
4. A. N. Stirling and D. Watson, in *Progress in Low Temperature Physics*, ed. by D. F. Brewer, North Holland, Amsterdam (1986), Vol. 10, p. 683.
5. К. Д. Громов, М. Э. Ландсберг, в сб. *Тез. докл. X Всесоюзн. конф. по физике низких температур* (Ташкент, 1986), Наука, Москва (1987), с. 434.
6. M. P. Elliot, V. Rumford, and A. A. Smith, Preprint TH 4302-CERN (1988).
7. Л. Н. Шалимова, А. С. Крюков, Препринт ОИЯИ № Р-16-22 (1987).
8. Н. В. Васильев, Дисс. ... канд. физ.-матем. наук, МГУ, Москва (1985).
9. A. Fang and C. Howald, E-print archives, cond-mat/0404452.

6. Все рисунки должны быть выполнены четко, в формате, обеспечивающем ясность понимания всех деталей. Надписи на рисунках следует по возможности заменять цифрами и буквенными обозначениями, разъясняемыми в подписи к рисунку или в тексте.

7. Редакция посылает автору одну корректуру по электронной почте в виде *.pdf-файла. Список исправлений должен быть отправлен автором на электронный адрес журнала в течение недели.

9. К рукописи необходимо приложить электронный адрес (e-mail), почтовый адрес места работы с индексом, фамилию, полное имя и отчество автора, с которым предпочтительно вести переписку, а также номер контактного телефона.

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