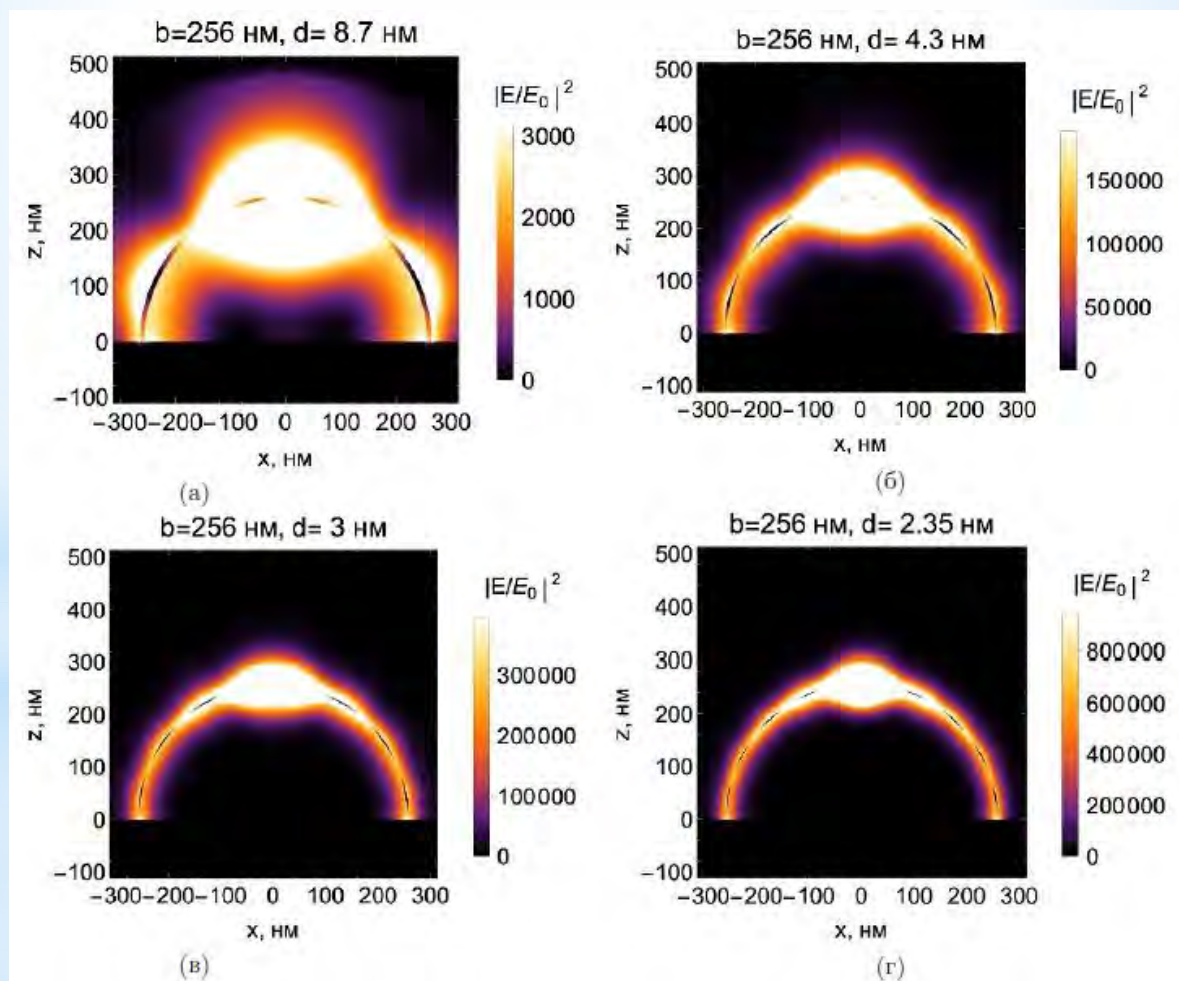




СОВРЕМЕННАЯ ЭЛЕКТРОДИНАМИКА

научный рецензируемый журнал



КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИГАНТСКОГО КОМБИНАЦИОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ
МОЛЕКУЛ В СФЕРИЧЕСКОЙ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ОБОЛОЧКЕ

А.В. Иванов, А.К. Сарычев, Н.В. Бахолдин, И.В. Быков, И.А. Рыжиков

ИЮНЬ -
ИЮЛЬ 2023

№ 3 (5)

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт теоретической и прикладной электродинамики
Российской академии наук

Журнал основан в 2022 году

Выпуск № 3 (5)

Современная электродинамика

научный рецензируемый журнал

Под редакцией академика РАН А.Н. Лагарькова

Москва, 2023

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт теоретической и прикладной электродинамики Российской академии наук

ISSN 2949-0553

Современная электродинамика

Научный рецензируемый журнал. Издаётся с октября 2022 года.

Выходит один раз в два месяца.

№ 3 (5)

июнь - июль 2023

Главный редактор академик РАН А.Н.Лагарьков

Редакционная коллегия: к.т.н. Н.П. Балабуха, к.т.н. К.М. Басков, д.ф.-м.н. А.П. Виноградов, д.ф.-м.н. А.А. Дорофеенко, д.ф.-м.н. В.Н. Кисель, к.ф.-м.н. К.И. Кугель, д.ф.-м.н. А.М. Мерзлякин, д.ф.-м.н. А.А. Пухов, д.ф.-м.н. А.Л. Рахманов, д.ф.-м.н. А.В. Рожков, д.ф.-м.н. К.Н. Розанов, к.т.н. И.А. Рыжиков, д.ф.-м.н. А.К. Сарычев, к.ф.-м.н. В.С. Солосин

Адрес редакции:

125412, г. Москва, ул. Ижорская, д.13, стр. 6

тел., факс 8 (495) 484-26-33

эл.почта electrodynamics@mail.ru

Зав. редакцией Е.В. Зеневич

Компьютерная вёрстка: Е.В. Зеневич

Свидетельство о регистрации Эл № ФС77-83666 от 26.07.2022 г.

Подписано в печать 03.08.2023. Тираж 30 экз.

© ИТПЭ РАН, 2023

Содержание номера

1 Теоретическая электродинамика	4
Рожков А.В., Сбойчаков А.О. СЮРПРИЗ МОДЕЛИ ХАББАРДА: КОНКУРЕНЦИЯ МНОЖЕСТВЕННЫХ НИЗКОЛЕЖАЩИХ УПОРЯДОЧЕННЫХ СОСТОЯНИЙ	4
Нефедкин Н.Е., Андрианов Е.С., Пухов А.А., Виноградов А.П. ЭФФЕКТИВНОЕ ПОДАВЛЕНИЕ ФАЗОВОГО ШУМА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВНЕШНЕЙ СИЛЫ В ЛИНЕЙНОМ ОСЦИЛЛЯТОРЕ	13
2 Вопросы экспериментальной электродинамики	23
Балабуха Н.П., Булычев Е.В., Зубов А.С., Меньших Н.Л., Солосин В.С., Федоров С.А. ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ НЕИДЕАЛЬНОСТИ ПОВЕРХНОСТИ ЗЕРКАЛА КОЛЛИМАТОРА МАРК-12 НА РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПОЛЯ В РАБОЧЕЙ ЗОНЕ	23
3 Взаимодействие электромагнитного поля с материалами	30
Иванов А.В., Сарычев А.К., Бахолдин Н.В., Быков И.В., Рыжиков И.А. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИГАНТСКОГО КОМБИНАЦИОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ МОЛЕКУЛ В СФЕРИЧЕСКОЙ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ОБОЛОЧКЕ	30
Иванов А.В., Быков И.В., Гарбилион Г., Сарычев А.К. ОПТИЧЕСКИЕ СЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ КРЕМНИЕВЫХ ДИСКОВЫХ РЕЗОНАТОРОВ	38

СЮРПРИЗ МОДЕЛИ ХАББАРДА: КОНКУРЕНЦИЯ МНОЖЕСТВЕННЫХ НИЗКОЛЕЖАЩИХ УПОРЯДОЧЕННЫХ СОСТОЯНИЙ

Рожков А.В. *¹, Сбойчаков А.О.¹

¹ *Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной электродинамики Российской академии наук, Москва, Россия*

Статья поступила в редакцию 30.06.2023
Одобрена после рецензирования 08.07.2023
Принята к публикации 31.07.2023

Аннотация

В работе мы обсуждаем конкуренцию низколежащих упорядоченных состояний для модели Хаббарда. Имеющиеся численные и аналитические расчеты, выполненные в различных режимах, однозначно показывают, что для гамильтониана Хаббарда и родственных моделей существует целый набор непохожих друг на друга несверхпроводящих низколежащих состояний с чрезвычайно близкими энергиями. Эти состояния конкурируют между собой за возможность стать «истинным» основным состоянием системы. Мы приводим аргументы в пользу того, что параметры этой конкуренции таковы, что ценность поиска единственного состояния с наименьшей энергией весьма ограничена. Современные результаты требуют пересмотра роли модели Хаббарда (и других подобных упрощенных моделей) в теоретических исследованиях многоэлектронных коррелированных систем. Мы также показываем, что модель Хаббарда со слабым взаимодействием может быть использована как удобный теоретический «полигон» для изучения такой конкуренции.

Ключевые слова: модель Хаббарда, основное состояние, легирование, волна спиновой плотности, фазовое расслоение, доменные стенки

EDN PETF AZ

DOI: 10.24412/2949-0553-2023-35-4-12

1. Введение

Семейство многочастичных гамильтонианов, сегодня ассоциированных с именем Хаббарда, изучается, начиная с работы [1] Шубина и Вонсовского, уже почти сто лет. Особенно много работ по данному предмету вышли после открытия высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) в купратных соединениях. Эта активизация связана с общим ожиданием, что «загадка» ВТСП кроется в свойствах модели Хаббарда (МХ).

Ажиотажный интерес к проблеме ВТСП стал главным фактором, формирующим контекст исследований МХ. В частности, стало фактически стандартом рассматривать гамильтониан Хаббарда (ГХ) в режиме достаточно сильного взаимодействия и при электронной концентрации, близкой к одному электрону на один узел решетки. (Теоретики, работающие с МХ, традиционно обозначают такое значение концентрации как «близкое к половине», имея в виду, что количество электронов на один узел решетки не может превышать двух.) При этом пределы слабого взаимодействия или малой концентрации электронов считались «бесперспективными». Ну и, пожалуй, самой главной целью проводимых исследований считалось объяснение сверхпроводимости с необычно высокой критической температурой.

Поставленная задача оказалась, однако, весьма сложной и до конца не решенной даже сегодня, спустя уже почти четыре десятилетия с момента открытия ВТСП. Главная трудность в исследовании МХ в «интересном» режиме состоит в том, что точных решений для ГХ неизвестно, а малые параметры, по которым можно было бы строить приближенные пертурбативные схемы, в задаче отсутствуют. Стоит

* Автор, ответственный за переписку: Александр Владимирович Рожков, alex.vl.rozhkov@yandex.ru

также отметить, что предлагаемые экспериментом рекомендации о том, в какой области параметров модели может находиться сверхпроводимость, являются весьма расплывчатыми. Экспериментальные данные указывают, что концентрация электронов не должна слишком сильно отклоняться от половинной, но и приближение к половине разрушает сверхпроводимость.

В 90-х и 2000-х годах мы стали свидетелями расцвета так называемых «неконтролируемых приближений». В рамках неконтролируемых подходов допускались преобразования, точность которых невозможно было строго установить (иными словами, точность невозможно было «контролировать»). Полученные таким образом результаты регулярно подвергались критике в силу отсутствия надежных обоснований использованных теоретических приемов. Альтернативой чисто аналитическим или полуаналитическим подходам выступали численные расчеты. Следует также помнить, что и сами численные инструменты исследований нередко опираются на неконтролируемые предположения, например, используют вариационную волновую функцию.

В результате рефлексии и осмысления накопленных результатов изучающее МХ исследовательское сообщество практически полностью отказалось от неконтролируемых аналитических приближений, а численные методы вышли на первый план. Конечно же, качественные улучшения компьютерного оборудования, произошедшие за последние десятилетия, возросшая доступность высокопроизводительного оборудования, а также прогресс в развитии численных приемов изучения МХ позволили получить новые интересные результаты в данной области.

Кроме этих, в общем-то, чисто методических уточнений, сама теоретическая мысль, зажатая в достаточно жесткие рамки сфокусированного на ВТСП нарратива, пришла к определенной переоценке исходной цели исследования. Дело в том, что экспериментально наблюдаемые «нормальные» (т.е., несверхпроводящие) свойства ВТСП купратов не всегда поддавались убедительному объяснению в рамках модели ферми-жидкости Ландау. Данный факт был воспринят как указание на то, что даже сам феномен сверхпроводимости с непривычно высокой критической температурой является лишь следствием необычных свойств нормального состояния. Такая интерпретация эксперимента привела к тому, что многие численные исследования затрачивают весьма значительные усилия на анализ именно нормальной фазы МХ.

Результаты, полученные благодаря воплощению данной научной программы в жизнь, оказались, однако, весьма неожиданными. А именно, выяснилось, что в низкоэнергетической части спектра модели расположены несколько почти вырожденных состояний весьма разной природы как сверхпроводящих, так и несверхпроводящих, пространственно-однородных и неоднородных. Разделенные весьма небольшими энергиями, эти состояния конкурируют за возможность стать истинным основным состоянием гамильтониана. Для иллюстрации этой особенности МХ можно привести работу [2], где эта конкуренция была не только явно отмечена, но и предпринята попытка оценить разницу энергий двух близлежащих состояний (одно сверхпроводящее, другое нет). Присутствие низколежащих состояний, характеризующихся т.н. фазовым расслоением, было отмечено в статье [3]. (Фазовое расслоение – это спонтанное возникновение областей-доменов, отличающихся друг от друга концентрацией электронов.)

В данной работе мы постараемся убедить читателя в том, что такое положение вещей требует переосмысления роли МХ как инструмента исследований многоэлектронных систем: множественность низколежащих состояний с близкой энергией означает, что поиск единственного основного состояния модели не может более рассматриваться как окончательная цель теоретических исследований. Кроме этого, мы продемонстрируем, что проблемы множественных почти вырожденных состояний не уникальны для «интересных» режимов МХ. Такие явления можно изучать в гораздо более «комфортных» теоретических условиях, предоставляемых моделями со слабым взаимодействием.

2. Гамильтониан Хаббарда: вводные замечания

В этой части мы формально введем модель Хаббарда и объясним основные обозначения. Итак, гамильтониан модели Хаббарда \hat{H} задается следующими формулами:

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{kin}} + \hat{H}_{\text{int}}, \quad \text{где} \quad \hat{H}_{\text{kin}} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma}, \quad \hat{H}_{\text{int}} = U \sum_i (\hat{n}_{i\uparrow} - 1/2)(\hat{n}_{i\downarrow} - 1/2). \quad (1)$$

Иными словами, ГХ может быть записан как сумма двух вкладов: слагаемое \hat{H}_{kin} представляет кинетическую энергию электронов, а слагаемое \hat{H}_{int} – энергию электрон-электронного взаимодействия. Символ $\hat{c}_{i\sigma}^\dagger$ обозначает оператор рождения электрона с проекцией спина $\sigma = \uparrow, \downarrow$ на узле i . Мы будем везде предполагать, что узлы организованы в простую трехмерную кубическую или двухмерную квадратную решетку, содержащую в общей сложности \mathcal{N} узлов. Оператор $\hat{c}_{i\sigma}$ сопряжен $\hat{c}_{i\sigma}^\dagger$ и отвечает за уничтожение электрона. Традиционное обозначение $\langle ij \rangle$ указывает на то, что узлы i и j являются

ближайшими соседями на решетке. Оператор $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}$ определяет количество электронов со спином σ на узле i .

Гамильтониан (1) характеризуется двумя величинами, имеющими размерность энергии. Первая такая величина – это коэффициент t , входящий в определение оператора кинетической энергии. Он называется амплитудой перескока на ближайший узел. Амплитуда t задает масштаб кинетической энергии электронов. Второй размерный коэффициент – это U в определении оператора \hat{H}_{int} . Его физический смысл – прирост потенциальной энергии системы в случае, когда два электрона находятся одновременно на одном узле. Чтобы убедиться в этом, удобно переписать \hat{H}_{int} следующим образом:

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{U}{4} \mathcal{N} - \frac{U}{2} \sum_i (\hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow}) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}. \quad (2)$$

В этой сумме первый член – это просто c -число, второй член – это интеграл движения (см. ниже), а третий член пропорционален числу узлов, на которых одновременно находятся два электрона. Каждый раз, когда число таких узлов меняется на единицу, модельная энергия межэлектронного взаимодействия меняется на величину U .

Отношение U/t определяет значимость многочастичных корреляций в системе, описываемой МХ. В пределе $U/t \rightarrow 0$ роль взаимодействия падает, а вместе с этим ослабевают и проявления корреляций. При $U = 0$ волновая функция системы представима в виде слэтеровского детерминанта. В противоположном пределе $U \gg t$ многочастичные корреляции сильны, и единого надежного описания свойств модели неизвестно.

Легко проверить, что следующие операторы

$$\hat{N} = \sum_i (\hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow}), \quad (3)$$

$$\hat{S}_z = \frac{1}{2} \sum_i (\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}) \quad (4)$$

коммутируют с гамильтонианом (1). Оператор \hat{N} – это полное число электронов в системе. Поскольку \hat{N} коммутирует с ГХ, число электронов N сохраняется. Удобно ввести два новых обозначения, традиционно используемых в литературе:

$$n = \frac{N}{\mathcal{N}}, \quad x = n - 1. \quad (5)$$

Величина n называется концентрацией (на один узел), а x – уровень легирования или уровень допирования. Принцип запрета Паули ограничивает значения n интервалом от нуля до двух: $0 < n < 2$. Случай $n = 1$ называют половинным заполнением именно потому, что это значение концентрации соответствует как раз середине допустимого интервала значений n . Уровень легирования x описывает отклонение от половинного заполнения и может быть как положительным (электронное легирование), так и отрицательным (дырочное легирование). Для многих важных случаев $|x|$ мало.

Оператор \hat{S}_z , определяемый формулой (4), соответствует проекции на ось z полного спина $\hat{\mathbf{S}}$ всего электронного коллектива. Равенство $[\hat{S}_z, \hat{H}] = 0$ означает, что проекция полного спина S_z – интеграл движения. Поскольку \hat{H} инвариантен относительно одновременного вращения спинов всех электронов в системе, две другие проекции $S_{x,y}$ также сохраняются (данное утверждение может быть доказано применением унитарных операторов \hat{U} , отвечающих за поворот всех спинов, к тождеству $[\hat{S}_z, \hat{H}] = 0$). За исключением случаев, когда значительная спиновая поляризация системы была создана целенаправленным внешним воздействием (например, приложением магнитного поля), удельная спиновая поляризация \mathbf{S}/\mathcal{N} стремится к нулю в термодинамическом равновесии.

Как мы видим, сама модель весьма проста. Гамильтониан (1) явным образом учитывает лишь одну электронную зону, ширина которой контролируется амплитудой перескока t . Также модель игнорирует взаимодействие между фононами и электронами, а кроме этого и дальнедействующую часть кулоновского взаимодействия. По сути, все взаимодействие сводится к исключительно локальному межэлектронному отталкиванию, характеризующемуся энергией U . При этом, несмотря на указанные упрощения и десятилетия исследований, гамильтониан Хаббарда остается не до конца понятным теоретическим объектом, привлекающим внимание активно работающих ученых.

3. Известные решения для модели Хаббарда

На сегодняшний день для МХ известно несколько случаев, допускающих аналитическое или частично аналитическое исследование. Во-первых, это предел малого U/t . Если $U/t \ll 1$, к гамильтониану

может быть применено приближение среднего поля. Этот подход позволяет описывать термодинамику и упорядоченные состояния МХ при $x = 0$. С некоторыми оговорками он применим и при $|x| \ll 1$. Работы такого типа были особенно популярны на рубеже веков, но впоследствии интерес к использованию метода среднего поля упал из-за того, что предел малого U неприменим к купратам, исследования которых были чрезвычайно востребованы в то время. Однако в недавней работе [4] приближение среднего поля было применено к ГХ для изучения конкуренции несверхпроводящих состояний.

Особняком стоит случай половинного заполнения $x = 0$. При малых значениях U можно воспользоваться методом среднего поля, который при половинном заполнении особенно прост. Этот случай будет рассмотрен ниже в части 5. В противоположном пределе $U/t \gg 1$ известно унитарное преобразование, отображающее ГХ на гамильтониан модели антиферромагнетика Гейзенберга. В обоих пределах основное состояние МХ с нулевым легированием обладает антиферромагнитным упорядочением. Также существенный прогресс достигнут и в изучении возбужденных состояний, термодинамики и т.д., смотри работу [5].

В заключении этой части отметим, что точное решение МХ возможно для одномерной решетки. Для этого необходимо воспользоваться так называемой подстановкой Бете. К сожалению, в силу узкой специализации этого метода, а также из-за определенной «патологичности» одномерных систем, обобщить получающиеся таким образом результаты на пространства больших размерностей не удастся.

4. Конкуренция состояний в режиме сильного взаимодействия

В силу ограниченности аналитического инструментария, доступного для исследования «интересного» режима сильных взаимодействий $U/t \gtrsim 1$ при ненулевом $|x|$, значительные усилия были вложены в развитие численных методов. В сочетании с впечатляющим прогрессом в области компьютерной техники это не могло не привести к появлению новых важных результатов.

Компьютерные исследования, нацеленные на определение основного состояния ГХ, столкнулись с неожиданным затруднением. Оказалось, что спектр ГХ устроен так, что рядом с основным состоянием соседствует еще как минимум одно или несколько состояний, чья энергия практически совпадает с энергией основного. В качестве примера работы, обсуждающей такую ситуацию, можно привести статью [2]. Авторы обнаружили, что три состояния разной структуры (диэлектрические диагональные доменные стенки в антиферромагнитной матрице; сосуществующие со сверхпроводимостью «вертикальные» доменные стенки; состояние без доменов, объединяющее в себе сверхпроводящий и антиферромагнитный параметры порядка) конкурируют друг с другом. Детали этой конкуренции можно уточнить, используя графики, представленные на Рис. 2а рассматриваемой статьи. Из приведенных данных следует, что типичная энергия на одну внесенную в процессе легирования дырку при рассматриваемых в работе параметрах равна примерно $1,5t$ для всех трех состояний, а вот разница в энергиях между ними составляет менее $0,008t$ (для расчетов с максимально доступной точностью).

При наличии такой жесткой конкуренции непохожих друг на друга многочастичных фаз с неизбежностью возникает следующий парадокс численного анализа. Расчеты энергии основного состояния, проводимые разными численными методами, находятся в согласии друг с другом. При этом другие наблюдаемые величины демонстрируют заметный разброс. Это связано с тем, что каждый конкретный метод вносит в расчет энергии конкретного состояния свою специфическую систематическую ошибку, предпочитая одну какую-то фазу из списка конкурентов в соответствии с особенностями своего алгоритма. Поскольку энергия у всех конкурирующих фаз практически одна и та же, а другие свойства могут принципиально отличаться, между ответами, полученными разными способами, возникает расхождение по энергии и расхождения по другим наблюдаемым. Данная особенность была, в частности, отмечена в работе [5], анализирующей широкий набор наиболее популярных численных результатов, опубликованных до 2015 г.

5. Конкуренция состояний в модели Хаббарда со слабым взаимодействием

Мы продемонстрируем в этой части, что конкуренцию низколежащих состояний можно исследовать вне пределов сильно коррелированных систем, и не используя узкоспециализированные инструменты компьютерного моделирования. Вместо этого можно работать с гамильтонианом со слабым взаимодействием, который допустимо исследовать с помощью метода среднего поля. Приближение среднего поля – это общезначимый подход, знакомый теоретикам по разным контекстам как квантовым, так и классическим. Такой весьма скромный набор требований к теоретическому багажу принципиально упрощает исследовательский процесс.

Модель, рассматриваемая в этой части, является разновидностью МХ. Мы будем считать, что наша система задана на трехмерной простой кубической решетке. Также как и модель, задаваемая

соотношениями (1), исследуемый ниже гамильтониан является суммой кинетической энергии и энергии межэлектронного взаимодействия. Мы, однако, хотим ввести в кинетический член \hat{H}_{kin} анизотропию типа «легкая плоскость». А именно, определим вклад, ответственный за кинетическую энергию, следующим образом:

$$\hat{H}_{\text{kin}} = - \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} t_{ij} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma}. \quad (6)$$

Данная формула подразумевает, что амплитуда перескока зависит от узлов i и j , между которыми происходит перескок. Мы зафиксируем следующую зависимость: $t_{ij} = t$, если вектор, соединяющий узлы i и j , лежит в плоскости Oxy (в базальной плоскости). Если же такой вектор параллелен оси Oz , то $t_{ij} = t_z < t$. Такой выбор амплитуд перескока означает, что электроны преимущественно движутся в одном каком-то слое, параллельном базальной плоскости. Перемещения из слоя в слой можно рассматривать как редкие события в пределе $t_z \ll t$. Если же положить $t_z \equiv 0$, то модель распадается на набор несвязанных друг с другом двумерных квадратных решеток.

Введение такой анизотропии позволяет решить сразу две проблемы. Во-первых, многие популярные классы кристаллов обладают подобной анизотропией. Во-вторых, анизотропия амплитуды перескоков позволяет решить формальный технический вопрос: благодаря анизотропии особенности ван Хофа в плотности одноэлектронных состояний смещаются с энергии Ферми, упрощая обоснование метода среднего поля.

Что касается члена \hat{H}_{int} , он будет иметь тот же вид, что и в соотношениях (1), но мы потребуем малости взаимодействия: $U/t \ll 1$. Именно это неравенство является критерием применимости приближения среднего поля к исследуемой модели.

Также мы отметим, что для управления электронной концентрацией удобно ввести в формализм химический потенциал μ и добавить стандартный член $-\mu\hat{N}$ в полный гамильтониан модели. В таком случае можно контролировать n , меняя μ , что и будет сделано нами в этой части статьи. Важный частный случай половинного заполнения $n = 1$ соответствует $\mu = 0$.

Хорошо известно, что при нулевом легировании $x = 0$ основное состояние нашего гамильтониана – это волна спиновой плотности (ВСП). По сути, ВСП является частным случаем антиферромагнетика. Традиционно ВСП называют антиферромагнетизм с малым значением локальной намагниченности. Для того, чтобы описать состояние с ВСП, мы введем следующий параметр порядка:

$$\Delta_i = \frac{U}{2} (\langle \hat{n}_{i\uparrow} \rangle - \langle \hat{n}_{i\downarrow} \rangle), \quad (7)$$

где $\langle \dots \rangle$ означает усреднение по отношению к основному состоянию модели. Следует сделать два замечания по поводу ур. (7). Во-первых, стоит обратить внимание на то, что значение параметра порядка Δ_i зависит от узла i : развиваемый нами формализм явно допускает возможность пространственно модулированного параметра порядка. Во-вторых, такой параметр порядка пропорционален проекции на ось z вектора локальной спиновой намагниченности. Это позволяет нам переписать ур. (7) таким образом: $\Delta_i = U s_z(i)$, где $s_z(i) = (\langle \hat{n}_{i\uparrow} \rangle - \langle \hat{n}_{i\downarrow} \rangle)/2$ – проекция спиновой намагниченности на узле i на ось z . Такая форма записи проясняет смысл термина «волна спиновой плотности».

Используя предложенный параметр порядка, можно аппроксимировать ГХ следующим среднеполевым гамильтонианом:

$$\hat{H}^{\text{MF}} = \hat{H}_{\text{kin}}^{\text{MF}} + \hat{H}_{\text{int}}^{\text{MF}}, \quad (8)$$

$$\hat{H}_{\text{kin}}^{\text{MF}} = \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} t_{ij} \left(\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + \text{H.c.} \right) - \sum_{i\sigma} \left(\mu - \frac{U x_i}{2} \right) \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}, \quad (9)$$

$$\hat{H}_{\text{int}}^{\text{MF}} = \sum_i \left[\Delta_i (\hat{c}_{i\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow} - \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i\uparrow}) - U \left(\frac{x_i(2 + x_i)}{4} - \frac{\Delta_i^2}{U^2} \right) \right], \quad (10)$$

где нами была введена локальная плотность легирования $x_i = \langle \hat{n}_{i\uparrow} \rangle + \langle \hat{n}_{i\downarrow} \rangle - 1$. В рамках среднеполевого подхода параметр порядка Δ_i и локальная плотность x_i вычисляются с помощью процедуры самосогласования.

Среднеполевой гамильтониан (8) квадратичен по операторам рождения и уничтожения. Кроме этого, он расщепляется на два слагаемых, каждое из которых соответствует одному какому-то значению проекции σ . Это позволяет записать гамильтониан (8) как

$$\hat{H}^{\text{MF}} = \sum_{ij\sigma} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \mathcal{H}_{ij}^\sigma \hat{c}_{j\sigma}, \quad (11)$$

где величины \mathcal{H}_{ij}^σ – это элементы матрицы \mathcal{H}^σ . (Размер \mathcal{H}^σ равен $\mathcal{N} \times \mathcal{N}$.) Поэтому процесс установления термодинамических и корреляционных свойств системы, описываемой \hat{H}^{MF} , сводится к диагонализации двух матриц размера $\mathcal{N} \times \mathcal{N}$ каждая. Нужно, однако, помнить, что при численном исследовании данную диагонализацию придется выполнять многократно для достижения самосогласования по Δ_i и x_i .

Условие самосогласования удобно интерпретировать как задачу о нахождении экстремума для большого канонического потенциала $\Omega = \Omega(\mu)$, задаваемого формулой:

$$\Omega = \sum_{\sigma} \sum_{S=1}^{\mathcal{N}^2} E_{\sigma}^{(S)} \Theta(-E_{\sigma}^{(S)}) - U \sum_i \left(\frac{x_i(2+x_i)}{4} - \frac{\Delta_i^2}{U^2} \right). \quad (12)$$

В данном выражении величины $E_{\sigma}^{(S)} = E_{\sigma}^{(S)}(\mu)$ являются собственными числами матриц $\mathcal{H}_{ij}^{\sigma}$. При фиксированном μ необходимо найти абсолютный минимум Ω как функции Δ_i и x_i . Такой минимум соответствует основному состоянию. Низколежащие локальные минимумы будут представлять метастабильные состояния, конкурирующие с основным. Стоит, тем не менее, не забывать, что поиск таких минимумов – весьма непростая задача. В общем случае неизвестен способ исчерпывающе указать все возможные экстремумы. На языке физики это означает, что для конкретной модели невозможно однозначно перечислить все допустимые виды упорядочения. Как правило, приходится просто перебирать варианты параметров порядка, вытекающие из опыта предыдущих исследований, согласующиеся с экспериментальными данными и общезначимой «интуицией».

Тем не менее, существуют удачные стечения обстоятельств, при которых тип упорядочения считается надежно установленным. Как мы уже отмечали ранее в части 3, для МХ таким «хорошим» случаем является предел половинного заполнения $x = 0$. Известно, что при отсутствии легирования пространственная структура параметра порядка имеет простой вид:

$$\Delta_i = (-1)^{i_x+i_y+i_z} \Delta_0, \quad (13)$$

где мы предполагаем, что положение узла i на простой кубической решетке можно задать тремя целочисленными декартовыми координатами (i_x, i_y, i_z) . Иными словами, в упорядоченном состоянии, описываемом параметром порядка (13), спиновые намагниченности на двух соседних узлах одинаковы по модулю, но противоположны по направлению. Знак Δ_0 устанавливается спонтанно в момент фазового перехода, а для $|\Delta_0|$ может быть выведено приближенное соотношение, выражающее $|\Delta_0|$ через t и U . Заметим также, что возникновение параметра порядка рассматриваемого типа приводит к открытию щели в спектре одноэлектронных возбуждений, поэтому нелегированное состояние гамильтониана Хаббарда обладает диэлектрическими свойствами.

Имеющееся у нас представление об основном состоянии при нулевом легировании помогает в исследовании случая конечного x . Поскольку мы знаем, что при $x = 0$ основное состояние характеризуется параметром порядка (13), мы ожидаем, что при предельном переходе $x \rightarrow 0$ структура параметра порядка (13) должна воспроизводиться. Эта деталь помогает сузить список перспективных типов упорядочения.

Несмотря на наличие упрощающих обстоятельств, поставленная задача требует привлечения численных расчетов. Стоит, тем не менее, помнить, что компьютерные инструменты, необходимые для этой работы, далеко не так сложны, как те, что используются для симуляции сильнокоррелированных режимов МХ. В частности, достаточно прямолинейный программный код для поиска экстремумов потенциала Ω , задаваемого ур. (12), может быть написан с опорой на общедоступные универсальные средства разработки. Окончательная программа исполняется на обычном офисном компьютере за несколько часов, а использование высокопроизводительного счетного оборудования не требуется вообще.

В результате такого исследования в статье [4] были идентифицированы три класса многочастичных состояний с низкой энергией, потенциально могущих конкурировать друг с другом за возможность стать основным состоянием. Рассмотрим эти три класса подробнее.

Класс I – это пространственно неоднородная фаза, демонстрирующая расслоение на области двух типов. В областях первого типа локальная концентрация носителей равна единице $n = 1$. Иными словами, дополнительных носителей заряда, внесенных в образец легированием, в этих областях нет, т.е. локально $x = 0$. В данных областях реализуется половинное заполнение и, как следствие, упорядочение (13). Такие области являются диэлектрическими.

Области второго типа являются проводящими: они аккумулируют все внесенные электроны, а параметр порядка там занулен. По мере того, как легирование растет, растет и полный объем, занятый областями второго типа. А вот концентрация носителей не зависит от уровня легирования, сохраняясь постоянной до тех пор, пока проводящие области не распространятся на весь объем системы.

В предельном переходе $x \rightarrow 0$ проводящие области исчезают, а упорядочение (13) восстанавливается во всем объеме образца, как мы и указывали выше.

Класс II. Многочастичные состояния этого класса похожи на состояния класса I: внесенный легированием заряд формирует ограниченные металлические области внутри диэлектрической матрицы. В отличие от первого класса, в тех областях, где скапливаются носители, упорядочение не разрушается полностью, но присутствует в ослабленном и несколько искаженном виде: там возникает т.н. несоизмеримая ВСП. Предельный переход $x \rightarrow 0$ восстанавливает упорядочение (13) во всем объеме образца, поскольку области с лишними носителями просто сжимаются в объеме до нуля.

Класс III. Состояния, образующие этот класс, можно охарактеризовать как «кристалл» из доменных стенок ВСП. Чтобы понять, как устроен такой «кристалл», нужно вначале разобраться с тем, что такое доменная стенка ВСП. Давайте модифицируем упорядочение (13) следующим образом:

$$\Delta_i = (-1)^{i_x+i_y+i_z} \tilde{\Delta}_{i_x}, \quad (14)$$

где $\tilde{\Delta}_{i_x}$ – медленная монотонная функция решеточной координаты i_x , удовлетворяющая одному из двух условий:

$$\lim_{i_x \rightarrow \pm\infty} \tilde{\Delta}_{i_x} = \pm|\Delta_0| \quad \text{или} \quad \lim_{i_x \rightarrow \pm\infty} \tilde{\Delta}_{i_x} = \mp|\Delta_0|. \quad (15)$$

Любое из этих условий подразумевает, что $\tilde{\Delta}_{i_x}$ проходит через ноль при некоем $i_x = I_x^{\text{DW}}$. При не слишком больших значениях $|i_x - I_x^{\text{DW}}|$ модуль параметра порядка $|\Delta_i|$ подавлен по сравнению с $|\Delta_0|$. Условия (15) подразумевают также, что на бесконечности Δ_i асимптотически приближается к структуре, выражаемой ур. (13). Но параметр порядка при $i_x \rightarrow +\infty$ отличается знаком от параметра порядка при $i_x \rightarrow -\infty$. Описанная конфигурация называется доменной стенкой, а плоскость $i_x = I_x^{\text{DW}}$ задает положение этой стенки в образце.

Сами по себе доменные стенки повышают энергию системы. По этой причине при $x = 0$ доменных стенок нет. Однако можно показать, что при легировании работа, требуемая для внесения в систему одного носителя заряда, уменьшается, если внесенный носитель локализуется внутри доменной стенки. Это свойство есть следствие подавления параметра порядка при $i_x \approx I_x^{\text{DW}}$. Поэтому при легировании возникновение доменных стенок становится выгодным. Доменные стенки в состоянии с конечным x параллельны друг другу и образуют пространственно периодическую структуру с периодом $l = l(x)$. Период монотонно уменьшается с ростом уровня легирования x . Именно эта конфигурация и называется «кристаллом» из доменных стенок.

Для того, чтобы охарактеризовать конкуренцию рассмотренных классов состояний, удобно пользоваться энергией на один внесенный носитель. Для класса I эта величина может быть вычислена аналитически [4]. Она равна $\Delta_0/\sqrt{2} \approx 0,707\Delta_0$. Численный расчет дает $0,698\Delta_0$ для класса II. Для класса III получается интервал значений от примерно $0,69\Delta_0$ для модели с высокой анизотропией до примерно $0,64\Delta_0$ для низкой анизотропии. Мы видим, что доменный кристалл имеет самую низкую энергию на один заряд. Таким образом, при легировании именно состояние с доменными стенками является основным состоянием модели. Однако энергии для двух других классов чрезвычайно близки: разница в энергиях не превосходит $0,06\Delta_0$. Мы приходим к заключению, что МХ в режиме слабого взаимодействия демонстрирует конкуренцию низколежащих состояний.

6. Обсуждение и выводы

Конкуренция нескольких низколежащих состояний – интересная и достаточно неожиданная особенность МХ. Численные работы, исследовавшие МХ в режиме сильного взаимодействия, стали явно отмечать эту черту примерно последние десять лет. Стоит, тем не менее, помнить, что МХ в режиме сильных корреляций не является уникальной платформой, где такая конкуренция может развернуться. Эта мысль была сформулирована и подкреплена конкретными примерами в статье [4]. Более того, если рассматривать такую конкуренцию как общую проблему, потенциально затрагивающую широкий спектр моделей, то быстро выяснится, что сильные корреляции не являются необходимым условием такой конкуренции. При этом наличие корреляций в модели без нужды усложняет анализ. Действительно, как мы отмечали выше, учет сильных корреляций в многочастичных системах в настоящий момент невозможен вне численных методов. Соответствующее программное обеспечение может создаваться и совершенствоваться годами, требуя усилий как физиков-теоретиков, так и специалистов по эффективным современным методам программирования. Даже в тех случаях, когда разработанный компьютерный код делается свободно доступным для всех желающих, освоение его с нуля может занять длительное время. В противовес такому подходу, для изучения конкуренции множественных состояний мы предлагаем

использовать модели в режиме слабого взаимодействия. Такой анализ был представлен в работе [4]. Выше мы изложили основные технические приемы и выводы этой статьи.

Что наличие множественных конкурирующих фаз означает для исследовательского процесса? Видимо, нужно согласиться с тем, что поиски единственного основного состояния МХ, хотя и интересны с академической точки зрения, не могут рассматриваться как окончательная цель. Необходимо помнить, что простые гамильтонианы типа ГХ явным образом пренебрегают множеством деталей, неизбежно присутствующих в реальных кристаллах. К таким деталям относится дальнедействующее кулоновское взаимодействие, взаимодействие между электронами и решеткой, наличие примесей и т.д. В ситуации, когда несколько термодинамических фаз, да еще и обладающих разной структурой, населяют низколежащую часть спектра, такие отброшенные поправки могут сыграть решающую роль в стабилизации какого-то конкретного состояния. Например, дальнедействующее взаимодействие повысит энергию любого неоднородного состояния по сравнению с однородными состояниями. Неоднородные фазы без определенной пространственной структуры (типа состояний классов I и II, представленных выше) могут предпочесть какую-то конкретную структуру, минимизирующую кулоновское взаимодействие. В такой ситуации приоритетной задачей должна стать не изнурительная и ресурсоемкая «охота» за единственным и неповторимым основным состоянием, а составление списка низколежащих фаз. С точки зрения сравнения теории и эксперимента такой список может оказаться полезнее знания об основном состоянии идеализированного модельного гамильтониана. Отметим также и следующее обстоятельство. Мы только что упомянули, что кулоновское дальнедействующее отталкивание будет повышать энергию неоднородных фаз по сравнению с однородными. С другой стороны, дефекты, пиннингуя спонтанно возникшие неоднородные структуры, могут понижать энергию именно неоднородных фаз. Это лишь два конкретных примера воздействия неучтенных поправок на конкуренцию состояний. По видимому, будет полезно расширить подобный анализ и разобраться с влиянием и других вкладов, не учтенных МХ, но присутствующих в реальных системах. С точки зрения чисто теоретического знания интересным представляется вопрос о происхождении описываемой конкуренции. Поскольку мы видим приближенное вырождение нескольких низколежащих многочастичных состояний, мы можем предположить, что за этим вырождением скрывается некая приближенная симметрия. Если эта гипотеза верна, то следующие два наблюдения, возможно, будут полезны в вопросе идентификации такой симметрии. Во-первых, эта симметрия полностью или частично разрушается дальнедействующим кулоновским взаимодействием. Во-вторых, симметрия также присутствует и в других моделях, необязательно решеточных. На последнее обстоятельство указано в работе [4].

Заканчивая обсуждение, хотелось бы напомнить основные тезисы работы. Мы рассматривали конкуренцию низколежащих состояний в модели Хаббарда. Опубликованные статьи, посвященные численному исследованию МХ в режиме сильного взаимодействия, дают достаточно оснований считать такую конкуренцию реально существующей особенностью гамильтониана Хаббарда с сильным взаимодействием. Подобную конкуренцию можно обнаружить и при слабом взаимодействии. В отличие от режима сильных корреляций, модели со слабым взаимодействием можно изучать аналитически или полуаналитически. Это существенно упрощает требования к исследовательскому инструментарию. Наличие нескольких фаз, разделенных лишь небольшой разницей энергий, требует пересмотра теоретических подходов к исследованию модельных гамильтонианов.

Список литературы

- [1] Schubin S., Wonsowsky S. On the Electron Theory of Metals // Proceedings of The Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. — 1934. — Vol. 145. — P. 159–180.
- [2] Corboz P., Rice T. M., Troyer M. Competing States in the t - J Model: Uniform d -Wave State versus Stripe State // Physical Review Letters. — 2014. — Jul. — Vol. 113. — P. 046402.
- [3] Variational Monte Carlo method for fermionic models combined with tensor networks and applications to the hole-doped two-dimensional Hubbard model / Zhao H.-H., Ido K., Morita S., and Imada M. // Physical Review B. — 2017. — Aug. — Vol. 96. — P. 085103.
- [4] Competition of spatially inhomogeneous phases in systems with nesting-driven spin-density wave state / Kokanova S. V., Maksimov P. A., Rozhkov A. V., and Sboychakov A. O. // Physical Review B. — 2021. — Aug. — Vol. 104. — P. 075110.
- [5] Solutions of the Two-Dimensional Hubbard Model: Benchmarks and Results from a Wide Range of Numerical Algorithms / LeBlanc J. P. F., Antipov A. E., Becca F., Bulik I. W., Chan G. K.-L., Chung C.-M., Deng Y., Ferrero M., Henderson T. M., Jiménez-Hoyos C. A., Kozik E., Liu X.-W., Millis A. J., Prokof'ev N. V., Qin M., Scuseria G. E., Shi H., Svistunov B. V., Tocchio L. F., Tupitsyn I. S., White S. R., Zhang S., Zheng B.-X., Zhu Z., and Gull E. // Physical Review X. — 2015. — Dec. — Vol. 5. — P. 041041.

HUBBARD MODEL SURPRISE: COMPETITION OF MULTIPLE LOW LYING ORDERED STATES

Rozhkov A.V.^{1*}, Sboychakov A.O.¹

¹ Institute for Theoretical and Applied Electromagnetics of RAS, Moscow, Russia

* alex.vl.rozhkov@yandex.ru

Abstract

In this paper, we discuss the competition of low-lying ordered states in the spectrum of Hubbard model. Available numerical and analytical calculations performed in various regimes show unambiguously that for the Hubbard and similar Hamiltonians, there is a whole set of dissimilar non-superconducting low-lying states with extremely close eigenenergies. These states compete with each other for the opportunity to become the ground state of the system. We argue here that the parameters of this competition are such that the value of finding the single state with the lowest eigenenergy is very limited. Currently available results suggest the need for the re-evaluation of the role played by the Hubbard model (and other related simplified models) in theoretical studies of many-electron correlated systems. We also show that the weak interaction Hubbard model can be used as a convenient theoretical playground for studying such competition.

Key words: Hubbard model, ground state, doping, spin-density wave, phase separation, domain walls

ЭФФЕКТИВНОЕ ПОДАВЛЕНИЕ ФАЗОВОГО ШУМА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВНЕШНЕЙ СИЛЫ В ЛИНЕЙНОМ ОСЦИЛЛЯТОРЕ

Нефедкин Н.Е.^{1,2,3}, Андрианов Е.С.^{1,2}, Пухов А.А.^{2,3}, Виноградов А.П. *^{1,2,3}

¹ Федеральное государственное унитарное предприятие “Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова”, Москва, Россия

² Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования “Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)”, Москва, Россия

³ Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной электродинамики Российской академии наук, Москва, Россия

Статья поступила в редакцию 21.06.2023

Одобрена после рецензирования 26.07.2023

Принята к публикации 31.07.2023

Аннотация

В работе рассматриваются вынужденные колебания линейного осциллятора, взаимодействующего с резервуаром, ответственным за диссипацию и шумовое воздействие. Известно, что в случае линейного осциллятора шумы на значения частоты вынужденных колебаний не влияют, а затухание автокорреляционной функции амплитуды не зависит ни от свойств осциллятора, ни от параметров внешнего воздействия, а определяется только шумами. В работе установлено, что, в отличие от амплитуды осциллятора, существуют определённые значения амплитуды и частоты внешнего поля, а также скорости диссипации осциллятора, которые разделяют два различных режима динамики фазы осциллятора. В первом режиме шумы фазы осциллятора и коэффициент диффузии фазы не зависят от свойств внешней силы и определяются взаимодействием осциллятора с резервуаром. Как следствие, автокорреляционная функция косинуса фазы на больших временах затухает. Во втором режиме коэффициент диффузии фазы становится зависящим не только от взаимодействия с резервуаром, но и от параметров внешней силы. Эта зависимость проявляется в том, что в этом режиме коэффициент диффузии уменьшается на два порядка. Как следствие, на больших временах автокорреляционная функция косинуса фазы не затухает, т.е. система «помнит» начальное значение фазы. На языке уравнения Адлера для фазы показано, что переход от первого режима ко второму происходит, когда эффективный потенциал для фазы становится немонотонной функцией.

Ключевые слова: стохастический резонанс, фазовый шум, диффузия фазы, время корреляции фазы, влияние шумов и диссипации на поведение фазы линейного осциллятора

EDN P1NBPE

DOI: 10.24412/2949-0553-2023-35-13-22

Введение

Когерентная динамика открытых систем различной физической природы в последнее время привлекает всё большее внимание [1]. Прежде всего, стоит упомянуть открытые квантовые системы общего вида [2, 3], кубиты [4], химические и биологические системы [5–7].

Квантовая система взаимодействует с многомодовым окружением, становится открытой при попытке исключить из уравнений движения явную зависимость от резервуара. Обычно такое исключение приводит к одновременному появлению потерь и шумов в системе [5, 8]. В ряде случаев их наличие может существенно изменить динамику системы, не взаимодействующей с резервуаром. Потери энергии могут быть компенсированы добавлением активных сред и их накачкой, например, в ламповых генераторах [9], в лазерах [10–12], в активных метаматериалах [13–16], РТ-симметричных системах [17–19] и т.д. В то же время шумы в открытых системах являются более серьёзной проблемой, чем потери. Даже в том случае, когда накачка компенсирует потери энергии, существует конечное время сбоя фазы сигнала,

* Автор, ответственный за переписку: Алексей Петрович Виноградов, a-vinogr@yandex.ru

приводящее к тому, что спектр сигнала системы имеет конечную ширину. Особый интерес представляет класс задач, связанных с эффективным подавлением шумов. В зависимости от системы этого можно добиться разными путями. Например, в лазерах для увеличения времени коррелированности фазы необходимо существенно превзойти порог генерации (закон Шавлова – Таунса). В том случае, когда не удается создать высокий уровень накачки, например, в низкодобротных лазерах [18, 20, 21], в активных метаматериалах [22, 23], могут быть использованы эффекты подавления шума, такие как стохастический резонанс [16], нелинейная фазовая синхронизация [24].

Спектр сигнала в зависимости от класса задач может быть определен разными способами. Одним из основных является амплитудный спектр, определяемый по теореме Винера-Хинчина как фурье-образ автокорреляционной функции амплитуды сигнала. В этом случае описанные выше эффекты подавления шума зависят от нелинейных свойств системы. В случае линейного осциллятора затухание автокорреляционной функции амплитуды определяется только корреляционными свойствами шума и не зависит от свойств осциллятора и параметров внешнего воздействия, так что изменить время затухания амплитуды колебаний, не воздействуя на шумы, не удастся.

Однако во многих ситуациях существенную роль играет не амплитудный, а фазовый спектр. Это имеет место, например, в задачах об эффекте Джозефсона [25, 26], где существенную роль играет разность фаз волновых функций по обе стороны джозефсоновского контакта, в эффекте Саньяка [27, 28], где точность измерения угловой скорости связана с временем корреляции фазы [29]. Отметим, что даже в том случае, когда отклик системы по амплитуде является линейным, фаза отклика нелинейно зависит от параметров внешнего воздействия, и её динамика является нетривиальной [30, 31]. В этой связи интерес представляет задача о возможности увеличения времени корреляции фазы периодическим внешним воздействием.

В настоящей работе исследуются фазовые флуктуации линейного диссипативного осциллятора, взаимодействующего с внешней силой. Установлено, что существуют определённые значения амплитуды и частоты внешнего поля, которые разделяют два различных режима динамики системы. Характерными величинами, которые отличают данные режимы, являются величина коэффициента диффузии фазы и поведение автокорреляционной функции косинуса фазы на больших временах. В первом режиме шумы фазы осциллятора и коэффициент диффузии фазы не зависят от свойств внешней силы. Как следствие, автокорреляционная функция косинуса фазы на больших временах затухает. Во втором режиме шумы подавляются, что проявляется в уменьшении коэффициента диффузии фазы. Как следствие, на больших временах автокорреляционная функция косинуса фазы не затухает, т.е. система «помнит» начальное значение фазы. На языке уравнения Адлера для фазы показано, что переход от первого режима ко второму происходит, когда эффективный потенциал для фазы становится немонотонной функцией.

Поведение линейного осциллятора под воздействием шумов и внешней силы

Рассмотрим осциллятор, на который действует внешняя гармоническая сила. Уравнение его движения имеет вид:

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x = B \cos \omega t, \quad (1)$$

где ω – частота внешнего гармонического воздействия, ω_0 – собственная частота осциллятора, B – это амплитуда внешней силы. На данном этапе рассматривается осциллятор без потерь. Ниже мы введем резервуар гармонических осцилляторов и покажем, что взаимодействие с таким резервуаром придет к появлению потерь.

Мы будем рассматривать случай, когда частоты осциллятора и внешнего воздействия близки, $|\omega - \omega_0| \ll \omega, \omega_0$. В этом случае возможно перейти к рассмотрению медленных огибающих быстрых колебаний осциллятора, используя метод усреднения Ван-дер-Поля [32]. Действительно, произведём в уравнении (1) замену

$$x(t) = \frac{1}{2} (v(t)e^{i\omega t} + v^*(t)e^{-i\omega t}), \quad (2)$$

считая $v(t)$ медленно меняющейся функцией. Далее, усредняя по периоду внешней силы уравнение (1) и накладывая на новую комплексную переменную $v(t)$ условие [33]

$$\dot{v}(t)e^{i\omega t} + \dot{v}^*(t)e^{-i\omega t} = 0, \quad (3)$$

получаем следующее уравнение:

$$\dot{v} = - \left(i \frac{\omega^2 - \omega_0^2}{2\omega} \right) v - i \frac{B}{2\omega} \approx -i\Delta v - i\Omega. \quad (4)$$

В последнем равенстве мы использовали $|\omega - \omega_0| \ll \omega, \omega_0$ и ввели обозначение для расстройки частот $\Delta = \omega - \omega_0 \frac{\omega^2 - \omega_0^2}{2\omega} = \frac{(\omega - \omega_0)(\omega + \omega_0)}{2\omega} \approx \Delta = (\omega - \omega_0)$ и амплитуды внешней силы $\Omega = B/2\omega$.

Теперь рассмотрим взаимодействие осциллятора с резервуаром из гармонических осцилляторов и покажем, что присутствие резервуара приводит к появлению диссипации и случайного шума. Будем полагать, что частоты осцилляторов резервуара равномерно занимают интервал частот $(\omega_0 - \Delta_R, \omega_0 + \Delta_R)$ так, что $|\omega - \omega_0| \ll \Delta_R \ll \omega_0, \omega$. Ещё одно условие на Δ_R , а именно $\Delta_R \gg \gamma, \Delta$, мы получим в конце этого раздела. Так как $|\omega_k - \omega_0| = |\Delta_k| \leq \Delta_R \ll \omega_0, \omega$, то уравнения движения для комплексных медленных амплитуд осциллятора системы и осцилляторов резервуара имеют вид:

$$\begin{aligned} \dot{v} &= -i\Delta v - i\Omega - i \sum_k \Omega_k z_k(t), \\ \dot{z}_k &= -i\Delta_k z_k(t) - i\Omega_k v(t) \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь $|\Delta_k| = |\omega_k - \omega| \ll \omega, \omega_0$ Ω_k – константа взаимодействия осциллятора с k -ой модой резервуара z_k , имеющей частоту $\omega + \Delta_k$. Чтобы получить замкнутое уравнение на амплитуду осциллятора v , нам следует формально проинтегрировать второе уравнение в (5) и подставить его в уравнение на v . Отсюда получаем

$$\dot{v} = -i\Delta v - i\Omega - \sum_k \Omega_k^2 \int_0^t dt' v(t') e^{-i\Delta_k(t-t')} + f_v(t), \quad f_v(t) = -i \sum_k \Omega_k z_k(0) e^{-i\Delta_k t}. \quad (6)$$

Заменяя суммирование по переменным резервуара на интегрирование и предполагая, что резервуар находится в равновесном состоянии, так что

$$\langle z_k(0) \rangle_R = \langle z_k^*(0) \rangle_R = \langle z_k(0) z_k(0) \rangle = \langle z_k^*(0) z_k^*(0) \rangle = 0, \quad \langle z_k^*(0) z_k(0) \rangle = \bar{n}_k \delta_{kk'}, \quad (7)$$

получаем, что $f_v(t)$ удовлетворяет следующим корреляционным соотношениям:

$$\langle f_v(t) \rangle_R = \langle f_v^*(t) \rangle_R = 0, \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \langle f_v^*(t) f_v(t') \rangle_R &= \sum_k \sum_{k'} \Omega_k \Omega_{k'} \langle z_k^* z_{k'} \rangle_R e^{i(\omega_k - \omega)t - i(\omega_{k'} - \omega)t'} = \\ &= \sum_k \Omega_k^2 \bar{n}_k e^{i(\omega_k - \omega)(t-t')} = \int_{\omega_0 - \Delta_R}^{\omega_0 + \Delta_R} \rho(\omega') \Omega^2(\omega') \bar{n}(\omega') e^{i(\omega' - \omega)(t-t')} d\omega'. \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь мы ввели плотность состояний $\rho(\omega_k)$ для перехода от суммирования к интегрированию. Далее будем считать функции $\rho(\omega_k)$, $\Omega(\omega_k)$ и $\bar{n}(\omega_k)$ медленно меняющимися на интервале $2\Delta_R$. Тогда, вынося $\rho(\omega_k)$, $\Omega(\omega_k)$ и $\bar{n}(\omega_k)$ из-под знака интеграла и заменяя интеграл от экспоненты дельта-функцией, получаем

$$\langle f_v^*(t) f_v(t') \rangle_R = \rho(\omega_0) \Omega^2(\omega_0) \bar{n}(\omega_0) \int_{\omega_0 - \Delta_R}^{\omega_0 + \Delta_R} e^{i(\omega' - \omega)(t-t')} d\omega'. \quad (10)$$

Далее заметим, что подынтегральная функция, когда рассматриваются времена $t' - t \gg 1/\Delta_R$, является быстроосциллирующей, и основной вклад в интеграл даёт окрестность вблизи точки $\omega' = \omega$. В этом случае мы можем распространить пределы интегрирования до бесконечности и получить:

$$\begin{aligned} \langle f_v^*(t) f_v(t') \rangle_R &\simeq \rho(\omega_0) \Omega^2(\omega_0) \bar{n}(\omega_0) \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega' - \omega)(t-t')} d\omega' = \\ &= 2\pi \rho(\omega_0) \Omega^2(\omega_0) \bar{n}(\omega_0) \delta(t - t') = 2\gamma \bar{n} \delta(t - t') = 2D \delta(t - t') \end{aligned} \quad (11)$$

где величины γ и D имеют вид

$$\gamma = \pi \rho(\omega_0) \Omega^2(\omega_0), \quad D = \bar{n}(\omega_0) \gamma. \quad (12)$$

Интегрируя обе части (11), можно получить

$$\gamma = \frac{1}{\bar{n}} \int_{-\infty}^{\infty} \langle f_v^*(t) f_v(t') \rangle_R dt'. \quad (13)$$

Данное выражение связывает скорость затухания системы γ и корреляционную функцию резервуара. Оно является отражением флуктуационно-диссипационной теоремы, связывающей отклик линейной

системы на внешнее воздействие со спектральными характеристиками этой системы в равновесии [34]. Действительно, при наличии какой-либо внешней силы, выводящей систему из равновесия, константа γ будет иметь смысл скорости диссипации.

Уравнение осциллятора с учетом шума примет вид

$$\dot{v} = (-i\Delta - \gamma)v - i\Omega + f_v(t). \quad (14)$$

Данное уравнение описывает процесс Орнштейна-Уленбека для комплексной амплитуды v . Усредняя (14) по различным реализациям, мы приходим к обычному уравнению осциллятора с диссипацией, но уже для средней комплексной амплитуды $\langle v \rangle$. Решение данного уравнения имеет вид [34]:

$$\langle v(t) \rangle = v_0 e^{-t(\gamma+i\Delta)} + \frac{i\Omega}{\gamma+i\Delta}, \quad (15)$$

а автокорреляционная функция амплитуды с учётом (10)

$$\langle v^*(t+\tau)v(t) \rangle = D \exp(-\tau(\gamma+i\Delta)) / (\gamma+i\Delta) + \frac{\Omega^2}{\gamma^2+\Delta^2}. \quad (16)$$

Здесь v_0 — начальное значение амплитуды v . Решение (15) описывает колебания осциллятора на частоте вынуждающей силы. Фурье-преобразование автокорреляционной функции (16) даст сумму δ -функции и лоренцевской линии с шириной γ .

Отметим следующее обстоятельство. При выводе корреляционного свойства (11) предполагалось, что времена t и t' удовлетворяют условию $t' - t \gg 1/\Delta_R$. Динамика автокорреляционной функции корректно воспроизводится формулой (16) только на временах $t' - t \gg 1/\Delta_R$. С другой стороны, из (15) и (16) видно, что характерное время изменения автокорреляционной функции амплитуды есть $1/\gamma$ или $1/\Delta$. Таким образом, необходимо, чтобы выполнялось соотношение $t' - t \ll 1/\gamma, 1/\Delta$. Отсюда получаем, что $\Delta_R \gg \gamma, \Delta$.

Автокорреляционная функция косинуса фазы

Результат, полученный в предыдущем разделе, хорошо известен. Однако, как было отмечено во введении, во многих задачах интерес представляет автокорреляционная функция фазы сигнала. Взяв за отправную точку случайную величину v , мы определяем случайную фазу как $\varphi = \arg v$, а случайную амплитуду как $A = |v|$. В таком случае амплитуда и фаза являются случайными величинами, которым соответствует система уравнений Ланжевена

$$\dot{A} = -\gamma A - \Omega \sin \varphi + f_A(t), \quad \dot{\varphi} = -\Delta - \frac{\Omega}{A} \cos \varphi + \frac{f_\varphi(t)}{A}, \quad (17)$$

получающаяся из (14) путём выделения амплитуды и фазы $v(t) = A(t) \exp(i\varphi(t))$. В данном разделе мы остановимся на более подробном рассмотрении фазовых флуктуаций осциллятора.

Для иллюстрации динамики фазы рассмотрим поведение автокорреляционной функции косинуса фазы:

$$C(t, t+\tau) = \langle \cos \varphi(t) \cos \varphi(t+\tau) \rangle. \quad (18)$$

Автокоррелятор (18) находим численно, моделируя стохастические дифференциальные уравнения (17) на основе разностной схемы, предложенной в [35]. При численном моделировании параметр γ фиксировался, и динамика системы рассматривалась при значении автокоррелятора шума $D = \gamma$. Все физические величины определялись как усреднение по многим независимым реализациям (17).

Оказалось, что при различных значениях расстройки Δ и амплитуды внешней силы Ω имеют место различные типы поведения автокоррелятора косинуса фазы (Рис. 1).

Видно, что, с одной стороны, автокоррелятор косинуса фазы при малой внешней силе экспоненциально спадает во времени (Рис. 3, синяя кривая). Корреляционную функцию (18) можно аппроксимировать как $C(\tau) \sim \langle \cos^2 \varphi(t) \rangle e^{-\alpha\tau}$. Таким образом, влияние шума на осциллятор довольно сильно сбивает его фазу, то есть за характерное время $1/\alpha$ система «забывает» начальную фазу. С другой стороны, при увеличении амплитуды внешней силы Ω автокоррелятор (18) перестает иметь вид затухающей экспоненты и становится осциллирующей с частотой Δ функцией. Это значит, что в ходе эволюции системы фаза не «забывается» под воздействием шума, а наоборот, внешняя сила приводит к подавлению шумовой компоненты и, как следствие, к коррелированности фазы.

Рассмотрим теперь, как зависит амплитуда автокоррелятора косинуса фазы от амплитуды внешней силы Ω . Также зафиксируем диссипацию в системе γ , спектральную плотность шумов D и примем

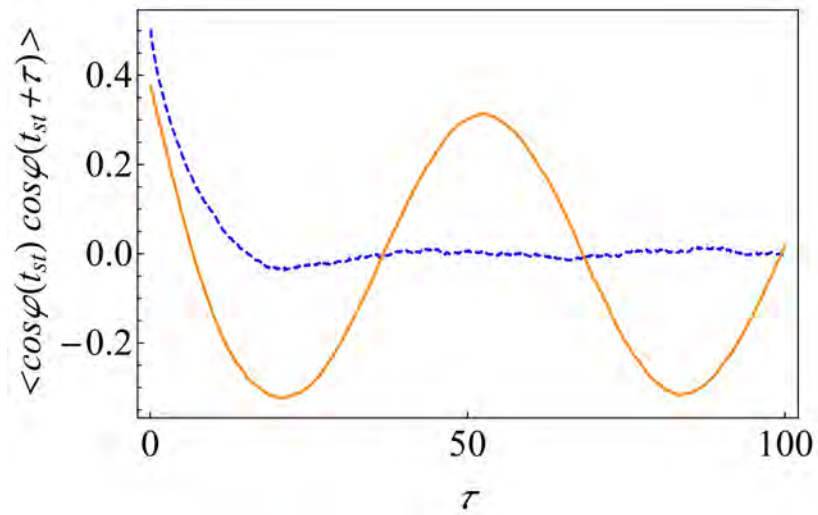


Рисунок 1 – Зависимость автокоррелятора $C(t_{st}, t_{st} + \tau) = \langle \cos \varphi(t_{st}) \cos \varphi(t_{st} + \tau) \rangle$ от времени τ при $D = \gamma$, $\Delta = 0.1$ и при различных значениях внешней силы: $\Omega = 0.05$ – синяя кривая, $\Omega = 1.15$ – оранжевая кривая. t_{st} – время достижения стационара системы

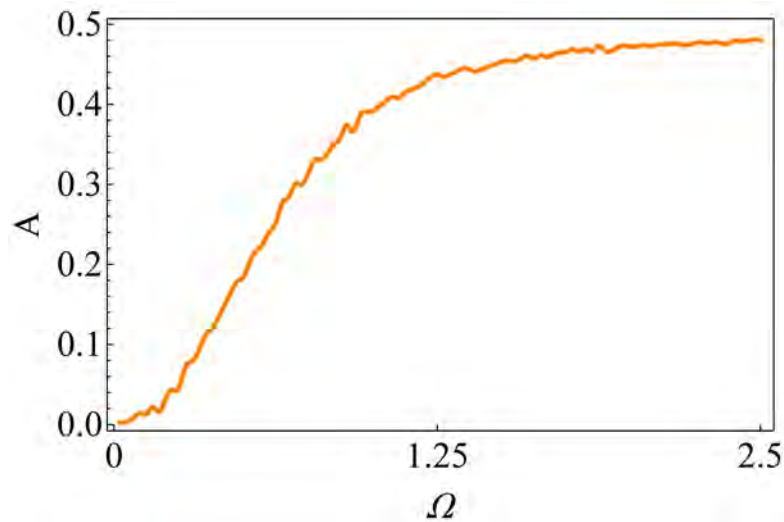


Рисунок 2 – Зависимость амплитуды автокоррелятора косинуса фазы от амплитуды внешней силы Ω

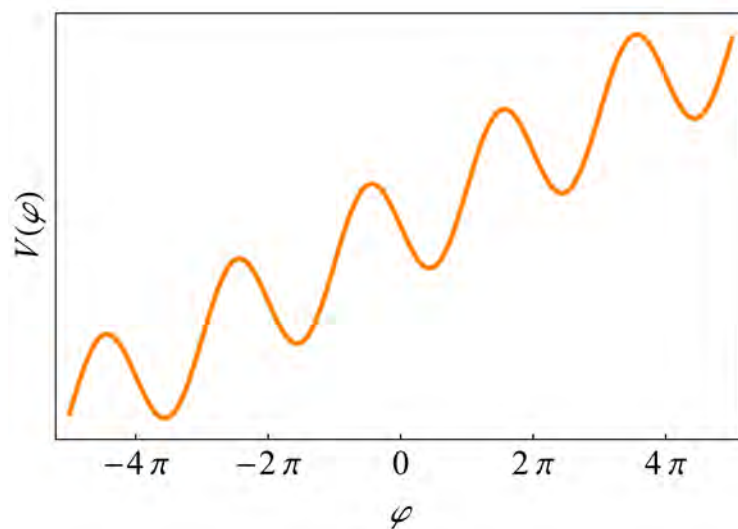


Рисунок 3 – Потенциал $V(\varphi)$, в котором происходит движение разности фаз φ

расстройку равной $\Delta = 0.1$. Данная зависимость представлена на Рис. 2. Поведение, представленное на Рис. 1 и 2, связано с динамикой фазы, которая задается вторым уравнением в (17). На временах $t \gg |1/\gamma|$ при условии малого шума и малой внешней силы в данном уравнении можно заменить $A(t)$ на постоянное значение A_0 . Тогда получим уравнение Адлера для фазы [36]

$$\dot{\varphi} \approx -\Delta - \frac{\Omega}{A_0} \cos \varphi. \quad (19)$$

Уравнение (19) описывает броуновское движение частицы с координатой φ в периодическом потенциале:

$$V(\varphi) = \Delta\varphi + \Omega/A_0 \sin \varphi. \quad (20)$$

В случае, когда $|\Delta| < |\Omega/A_0|$, минимумы потенциала $\varphi_n = -\arccos(-\Delta A_0/\Omega) + 2\pi n$ соответствуют режиму синхронизации, то есть мгновенная разность фаз в отсутствие шума остается постоянной во времени. Влияние же шума приводит к диффузии фазы в потенциале $V(\varphi)$: фаза флуктуирует вблизи минимумов φ_n и может совершать случайные перескоки в соседние потенциальные ямы (см. Рис. 3).

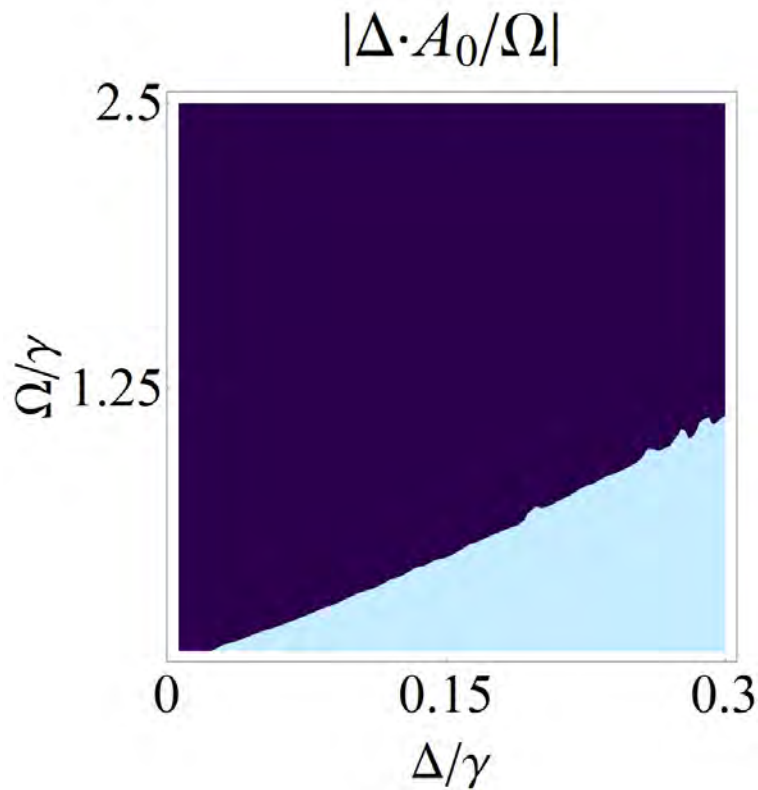


Рисунок 4 – Значение $|\Delta A_0/\Omega|$, определяющее форму потенциала $V(\varphi)$. Белые линии – скорость выхода амплитуды автокоррелятора косинуса фазы на стационарное значение

Оказывается, что скорость выхода амплитуды автокоррелятора косинуса фазы на стационарное значение (Рис. 4) и форма потенциала (рис. 5) связаны друг с другом. Для того чтобы это продемонстрировать, рассмотрим скорость выхода и значение величины $|\Delta A_0/\Omega|$, от которой зависит форма потенциала, на плоскости параметров (Ω, Δ) . На Рис. 6 фиолетовым цветом отмечены значения $|\Delta A_0/\Omega|$, меньше 1, что соответствует существованию минимумов у потенциала $V(\varphi)$. Голубая область соответствует отсутствию потенциальных ям и, как следствие, свободной диффузии фазы вниз по потенциалу.

Оценим среднее время выхода фазы из одной потенциальной ямы и переход её в другую в том случае, когда потенциальные ямы существуют. Для этого воспользуемся моделью Крамерса, с помощью которой скорость скачков фазы можно выразить через параметры потенциала как [10]

$$W = \frac{1}{2\pi} \sqrt{V''_{\min} |V''_{\max}|} \exp\left(-2 \frac{\Delta V}{D}\right), \quad (21)$$

где V''_{\min} и V''_{\max} – вторые производные потенциала по φ , вычисленные в точках минимума и максимума; $\Delta V = V(\varphi^{\max}) - V(\varphi^{\min})$. Вычисляя вторую производную потенциала уравнения (20), получаем

$V'' = -\frac{\Omega}{A_0} \sin \varphi$. Точки минимумов и максимумов имеют вид: $\varphi_n^{\min/\max} = \mp \arccos(-\Delta A_0/\Omega) + 2\pi n$. С учётом этого скорость выхода из минимума потенциала (20) принимает вид:

$$W = \frac{1}{2\pi} \exp\left(-2\left(2\sqrt{1 - A_0^2 \Delta^2 / \Omega^2} \Omega / A + 2\Delta \arccos(-A_0 \Delta / \Omega)\right) / D\right) \sqrt{1 - \frac{A_0^2 \Delta^2}{\Omega^2}} \Omega / A_0. \quad (22)$$

На плоскости параметров Ω, Δ скорость выхода из потенциальной ямы изображена на Рис. 5.

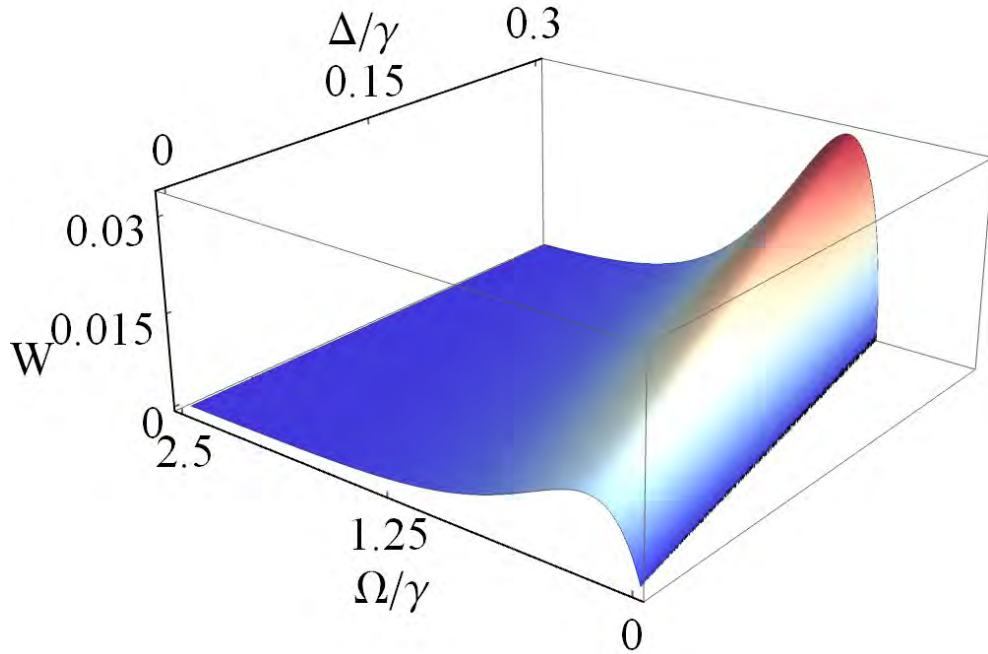


Рисунок 5 – Скорость выхода из потенциальной ямы в зависимости от параметров внешней силы, Ω, Δ при $D = \gamma$

Из Рис. 5 видно, что существует область параметров $|\Delta A_0/\Omega| > 1$, где скорость W не определена. Это соответствует отсутствию локальных минимумов у потенциала (18). Положение области, где W не определена, хорошо согласуется с «языком» Арнольда, полученным на Рис. 4 при тех же параметрах. В области большой амплитуды внешнего поля скорость ожидаемо мала, так как при увеличении Ω глубина потенциальных ям растёт.

Наряду со скоростью выхода из потенциальной ямы существует характеристика, отражающая диффузию фазы осциллятора под воздействием шума $f_\varphi(t)$. Фаза в таком случае диффундирует по закону $\langle \varphi^2 \rangle \sim D_{eff} t$. Эта характеристика определяется как

$$D_{eff} = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left(\langle \varphi^2 \rangle - \langle \varphi \rangle^2 \right), \quad (23)$$

то есть является углом наклона зависимости дисперсии фазы от времени и называется коэффициентом эффективной диффузии. Величина D_{eff} , а соответственно и скорость диффузии, растут вместе с увеличением интенсивности шума и зависят от средней продолжительности захвата фазы: чем длиннее интервалы захвата, тем медленнее растёт дисперсия фазы и меньше коэффициент диффузии. Отметим, что в случае $\Delta = 0$, т.е. резонанса частоты внешней силы и собственной частоты осциллятора, возможно получить аналитическое выражение для эффективной диффузии D_{eff} [36], которое показывает уменьшение D_{eff} до нуля при $\Omega \rightarrow \infty$. Однако для исследования вопроса зависимости D_{eff} как от амплитуды, так и от частоты внешней силы мы воспользуемся численным моделированием, поскольку аналитического выражения при $\Delta \neq 0$ неизвестно.

Для системы (21) результаты численного расчёта D_{eff} представлены на Рис. 6. Из Рис. 6 видно, что существуют две области параметров, отвечающие за наличие и отсутствие локальных минимумов у потенциала. Иными словами, на Рис. 6 мы наблюдаем «язык» Арнольда, как и на Рис. 4, 5. Очевидно, что чем глубже потенциальные ямы в (23), тем медленнее растёт дисперсия фазы и меньше сам коэффициент эффективной диффузии. Поэтому в области больших амплитуд внешней силы и сравнительно небольших расстройках D_{eff}/D практически равен нулю. Наоборот, в области малых амплитуд и больших расстройках нормированный коэффициент эффективной диффузии близок к 1.

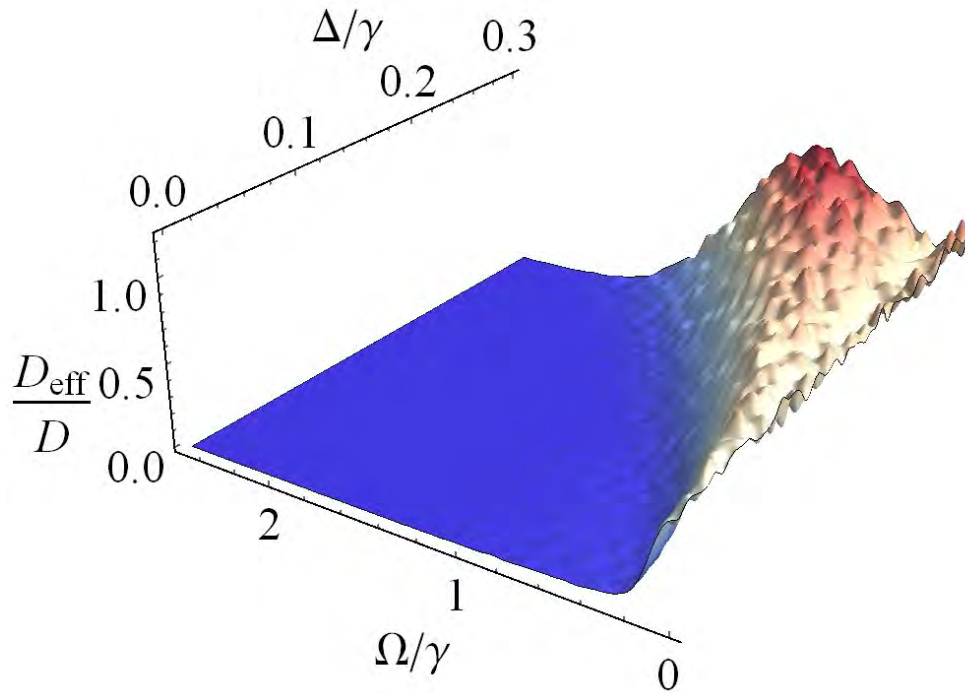


Рисунок 6 – Нормированный коэффициент эффективной диффузии, D_{eff}/D , в зависимости от Ω и Δ при $D = \gamma$

Таким образом, существуют параметры внешней силы, при которых коэффициент эффективной диффузии D_{eff} фазы $\varphi = \arg \nu$ много меньше коэффициента диффузии D для отклика ν . В этой области амплитуда автокоррелятора косинуса фазы выходит на отличное от нуля стационарное значение. Такая область параметров напоминает язык Арнольда для нелинейного осциллятора [36]. Однако отметим, что переход от области параметров, где фаза синхронизована к области отсутствия синхронизации, в отличие от нелинейной синхронизации, происходит непрерывно. Тем не менее, граница между этими двумя режимами достаточно резкая.

Заключение

В работе рассмотрены корреляционные свойства фазы линейного осциллятора, находящегося под одновременным воздействием внешней силы и резервуара. Показано, что эти два режима связаны с видом потенциала фазы в уравнении Адлера. При монотонном потенциале, соответствующем малым внешним воздействиям, фаза свободно диффундирует, что проявляется в затухании автокорреляционной функции на больших временах. С другой стороны, при больших амплитудах внешнего воздействия потенциал принимает немонотонный вид, у него появляются минимумы, что приводит к захвату фазы, т.е. к обращению коэффициента диффузии в ноль. Переход от одного режима к другому, в отличие от нелинейной синхронизации, происходит непрерывно, т.е. не существует резкой границы между режимами. При удалении от границы коэффициент диффузии экспоненциально стремится к нулю. Таким образом, в присутствии внешнего воздействия на осциллятор шумовое влияние резервуара на фазу системы эффективно подавляется.

Список литературы

- [1] Smirne A., Breuer H.-P., Piilo J., Vacchini B. Initial correlations in open-systems dynamics: the Jaynes-Cummings model // *Physical Review A*. – 2010. – Т. 82, № 6. – С. 062114.
- [2] Information dynamics and open systems: classical and quantum approach. / Ingarden R. S., Kossakowski A., Ohya M.: Springer Science & Business Media, 2013. – 324 с.
- [3] Nonlinear dynamics and chaos: with applications to physics, biology, chemistry, and engineering. / Strogatz S. H.: Westview press, 2014. – 512 с.
- [4] The Theory of Open Quantum Systems. / Breuer H.-P., Petruccione F. – Oxford: Oxford University Press, 2002. – 613 с.
- [5] Quantum theory of open systems. / Davies E. B. – London: Academic Press, 1976. – 171 с.

- [6] Chiorescu I., Bertet P., Semba K., Nakamura Y., Harmans C., Mooij J. Coherent dynamics of a flux qubit coupled to a harmonic oscillator // *Nature*. – 2004. – Т. 431, № 7005. – С. 159-162.
- [7] Lee H., Cheng Y.-C., Fleming G. R. Coherence dynamics in photosynthesis: protein protection of excitonic coherence // *Science*. – 2007. – Т. 316, № 5830. – С. 1462-1465.
- [8] Mabuchi H. Coherent-feedback quantum control with a dynamic compensator // *Physical Review A*. – 2008. – Т. 78, № 3. – С. 032323.
- [9] Marconi U. M. B., Puglisi A., Rondoni L., Vulpiani A. Fluctuation-dissipation: response theory in statistical physics // *Physics reports*. – 2008. – Т. 461, № 4. – С. 111-195.
- [10] Selected problems in the theory of fluctuations in radio engineering. / Stratonovich R. – Moscow: Sovetskoe Radio, 1961.
- [11] Введение в статистическую радиофизику и оптику. / Ахманов С. А., Дьяков Ю. Е., Чиркин А. С. – Москва: Наука, 1981. – 640 с.
- [12] Laser physics. / Sargent M., Scully M. O., Lamb W. E. – London: Addison-Wesley, 1974. – 432 с.
- [13] Optical coherence and quantum optics. / Mandel L., Wolf E. – Cambridge: Cambridge University Press, 1995. – 1166 с.
- [14] Light Vol. 2: Laser light dynamics. / Haken H. – Amsterdam: North-Holland, 1985. – 336 с.
- [15] Hess O., Tsakmakidis K. L. Metamaterials with Quantum Gain // *Science*. – 2013. – Т. 339. – С. 654-655.
- [16] Hess O., Pendry J. B., Maier S. A., Oulton R. F., Hamm J. M., Tsakmakidis K. L. Active nanoplasmonic metamaterials // *Nature Materials*. – 2012. – Т. 11. – С. 573-584.
- [17] Fang A., Koschny T., Soukoulis C. M. Lasing in metamaterial nanostructures // *J. Opt.* – 2010. – Т. 12, № 2. – С. 024013.
- [18] Andrianov E. S., Baranov D. G., Pukhov A. A., Dorofeenko A. V., Vinogradov A. P., Lisyansky A. A. Loss compensation by spasers in plasmonic systems // *Opt. Express*. – 2013. – Т. 21, № 11. – С. 13467-13478.
- [19] Bender C. M., Boettcher S. Real spectra in non-Hermitian Hamiltonians having PT symmetry // *Physical Review Letters*. – 1998. – Т. 80. – С. 5243-5246.
- [20] Bender C. M. Making sense of non-Hermitian Hamiltonians // *Report on Progress Physics*. – 2007. – Т. 70. – С. 947-1018.
- [21] Zyablovsky A. A., Vinogradov A. P., Pukhov A. A., Dorofeenko A. V., Lisyansky A. A. PT-symmetry in optics // *Phys. Usp.* – 2014. – Т. 57, № 11. – С. 1177-1198.
- [22] Noginov M., Zhu G., Belgrave A., Bakker R., Shalaev V., Narimanov E., Stout S., Herz E., Suteewong T., Wiesner U. Demonstration of a spaser-based nanolaser // *Nature*. – 2009. – Т. 460, № 7259. – С. 1110-1112.
- [23] Виноградов А. П., Андрианов Е. С., Пухов А. А., Дорофеенко А. В., Лисянский А. А. Квантовая плазмоника метаматериалов: перспективы компенсации потерь при помощи спазеров // *Успехи физических наук*. – 2012. – Т. 182, № 10. – С. 1122-1130.
- [24] Виноградов А. П., Дорофеенко А. В., Зухди С. К вопросу об эффективных параметрах метаматериалов // *Успехи физических наук*. – 2008. – Т. 178, № 5. – С. 511-518.
- [25] Nefedkin N., Andrianov E., Pukhov A., Vinogradov A. Stochastic resonance in the loss compensation regime of a plasmonic nanolaser // *Physical Review A*. – 2017. – Т. 96, № 3. – С. 033801.
- [26] Анищенко В., Астахов В., Вадивасова Т., Стрелкова Г. Синхронизация регулярных, хаотических и стохастических колебаний // *Известия высших учебных заведений. Прикладная нелинейная динамика*. – 2009. – Т. 17, № 2. – С. 145-151.
- [27] Coffey W., Dejaridin J.-L., Kalmykov Y. P. Nonlinear noninertial response of a Brownian particle in a tilted periodic potential to a strong ac force // *Physical Review E*. – 2000. – Т. 61, № 4. – С. 4599.
- [28] Coffey W., Dejaridin J.-L., Kalmykov Y. P. Nonlinear impedance of a microwave-driven Josephson junction with noise // *Physical Review B*. – 2000. – Т. 62, № 5. – С. 3480.
- [29] Малыкин Г. Б. Эффект Саньяка во вращающейся системе отсчета. Релятивистский парадокс Зенона // *Успехи физических наук*. – 2002. – Т. 172, № 8. – С. 969-970.
- [30] Малыкин Г. Б. Эффект Саньяка. Корректные и некорректные объяснения // *Успехи физических наук*. – 2000. – Т. 170, № 12. – С. 1325-1349.

- [31] Cresser J., Louisell W., Meystre P., Schleich W., Scully M. Quantum noise in ring-laser gyros. I. Theoretical formulation of problem // *Physical Review A*. – 1982. – Т. 25, № 4. – С. 2214.
- [32] *The Chaotic Pendulum*. / Gitterman M.: World Scientific, 2010. – 158 с.
- [33] *The Langevin Equation With Applications to Stochastic Problems in Physics, Chemistry and Electrical Engineering Second Edition*. / Coffey W. T., Kalmykov Y. P., Waldron J.: World scientific series in contemporary chemical physics, 1996. – 852 с.
- [34] *Нелинейные колебания*. / Кузнецов А., Кузнецов С., Рыскин Н. – Москва: Физматлит, 2005. – 292 с.
- [35] *Quantum optics*. / Scully M. O., Zubairy M. S.: Cambridge University Press, 1997.
- [36] *Нелинейные эффекты в хаотических и стохастических системах*. / Анищенко В., Астахов В., Вадивасова Т., Нейман А., Стрелкова Г., Шиманский-Гайер Л. – Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2003. – 544 с.
- [37] *Введение в статистическую радиофизику и оптику* /Ахманов С. А., Дьяков Ю. Е., Чиркин А. С. – Москва: Наука, 1981. – 640 с.

EFFICIENT SUPPRESSION OF PHASE NOISE BY A DRIVING FORCE IN A LINEAR OSCILLATOR

Nefedkin N.E.^{1,2,3}, Andrianov E.S.^{1,2}, Pukhov A.A.^{2,3}, Vinogradov A.P.*^{1,2,3}

¹ Dukhov Research Institute of Automatics, Moscow, Russia

² Moscow institutes of physics and technology, Moscow region, Russia

³ Institute for Theoretical and Applied Electromagnetics of RAS, Moscow, Russia

* a-vinogr@yandex.ru

Abstract

In this work, it is considered forced oscillations of a linear oscillator interacting with a reservoir responsible for dissipation and noise impact. It is known that in the case of a linear oscillator, noise does not affect the frequency of forced oscillations, and the damping of the autocorrelation function of the amplitude does not depend on either the properties of the oscillator or the parameters of the external action, but is determined only by noise. It is shown that, unlike the amplitude of the oscillator, there are certain values of the amplitude and frequency of the external field, as well as the rate of dissipation of the oscillator, which separate two different regimes of the oscillator phase dynamics. In the first regime, the phase noise of the oscillator and the phase diffusion coefficient do not depend on the properties of the external force and are determined by the interaction of the oscillator with the reservoir. As a consequence, the autocorrelation function of the phase cosine decays at large times. In the second regime, the phase diffusion coefficient becomes dependent not only on the interaction with the reservoir, but also on the parameters of the external force. This dependence manifests itself in the fact that in this regime the diffusion coefficient decreases by two orders of magnitude. As a consequence, the autocorrelation function of the phase cosine does not decay at large times; the system "remembers" the initial value of the phase. Using the formalism of the Adler equation for the phase, it is shown that the transition from the first regime to the second one occurs when the effective potential for the phase becomes a nonmonotonic function.

Key words: stochastic resonance, phase noise, phase diffusion, phase correlation time, influence of noises and dissipation on behavior of phase of linear oscillator

ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ НЕИДЕАЛЬНОСТИ ПОВЕРХНОСТИ ЗЕРКАЛА КОЛЛИМАТОРА МАРК-12 НА РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПОЛЯ В РАБОЧЕЙ ЗОНЕ

Балабуха Н.П.¹, Булычев Е.В. *¹, Зубов А.С.¹, Меньших Н.Л.¹, Солосин В.С.¹,
Федоров С.А.¹

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной электродинамики Российской академии наук, Москва, Россия

Статья поступила в редакцию 21.07.2023
Одобрена после рецензирования 28.07.2023
Принята к публикации 31.07.2023

Аннотация

В работе представлен анализ влияния отклонения отражающей поверхности зеркала коллиматора от теоретической на неравномерность распределения поля в рабочей зоне. На основе проведенных подробных исследований состояния поверхности зеркала коллиматора МАРК-12, расположенного в ИТПЭ РАН, разработана компьютерная модель данного зеркала. Проведены расчеты неравномерности распределения поля в рабочей зоне коллиматора для существующей и теоретической поверхности зеркала с использованием метода физической оптики. Определены вклады плавно меняющейся (влияние диаграммы направленности облучателя) и быстро меняющейся составляющих в неравномерность распределения поля в рабочей зоне.

Ключевые слова: компактный полигон, зеркальный коллиматор, рабочая зона, распределение поля, среднеквадратичная ошибка

EDN LHSGFW

DOI: 10.24412/2949-0553-2023-35-23-29

Введение

Зеркальные коллиматоры используются в радиофизических измерениях уже более полувека [1]. Зеркало коллиматора — это основная часть компактного полигона [2], позволяющая сформировать в некоторой области пространства распределение поля с допустимой неравномерностью распределения амплитуды и фазы. Компактный полигон предназначен для измерения характеристик рассеяния объектов и радиотехнических параметров излучения антенн с высокой точностью и в более благоприятных условиях [3], чем открытый полигон.

При проектировании зеркального коллиматора большое внимание уделяется кромкам зеркала [2]. Дифракционные эффекты на краях зеркала существенно влияют на неравномерность распределения поля в рабочей зоне в низкочастотной части рабочего диапазона. Существуют два основных способа уменьшения этого влияния: выполнение кромок зеркала в виде зубцов [4] или в виде отогнутых краев с обратной кривизной поверхности [5]. Оба подхода хорошо себя зарекомендовали [6].

Однако, с ростом частоты влияние кромок зеркала на неравномерность распределения амплитуды и фазы поля уменьшается [2, 6, 7]. Нижняя рабочая частота компактного полигона определяется размером зубцов или радиусом скруглений на краях зеркала. Верхняя рабочая частота ограничивается точностью изготовления поверхности реального зеркала, то есть тем, насколько она отличается от теоретической (параболоид вращения). В дальнейшем будем называть идеальностью поверхности отличие отражающей поверхности реального зеркала от теоретического.

Считается [3], что для получения приемлемых значений неравномерности поля в рабочей зоне отклонение поверхности зеркала от теоретической не должно превышать $\lambda/100$, где λ — рабочая длина самой короткой волны в рабочем диапазоне частот. Данное значение является оценочным. В

* Автор, ответственный за переписку: Егор Викторович Булычев, egor_itae@mail.ru

литературе подробные исследования поверхности зеркала коллиматора практически не освещаются, потому недостаточно информации о связи точности изготовления поверхности с неравномерностью распределения поля в компактном полигоне.

В данной работе представлены исследования влияния точности изготовления поверхности зеркала коллиматора на неравномерность распределения амплитуды и фазы поля в рабочей зоне коллиматора. Определены эффекты, связанные с влиянием облучателя. Выделены быстро меняющиеся составляющие неравномерности амплитуды поля, связанные с точностью изготовления поверхности зеркала коллиматора в различных диапазонах частот.

Зеркало коллиматора МАРК-12

Зеркало коллиматора МАРК-12 представляет собой несимметричную вырезку параболоида вращения с фокусным расстоянием 12 м (рисунок 1). Размер зеркала составляет около 11,6 x 13,8 м. Края зеркала коллиматора выполнены в виде зубцов длиной примерно 1,5 м и шириной - 1,2 м. Зубцы расположены по всему контуру зеркала и составляют вместе звездообразную кромку [8, 9]. Рабочий диапазон частот коллиматора от 0,8 ГГц до 40,0 ГГц. Рабочая зона представляет собой горизонтально расположенный цилиндр диаметром 6 м и длиной 10 м.

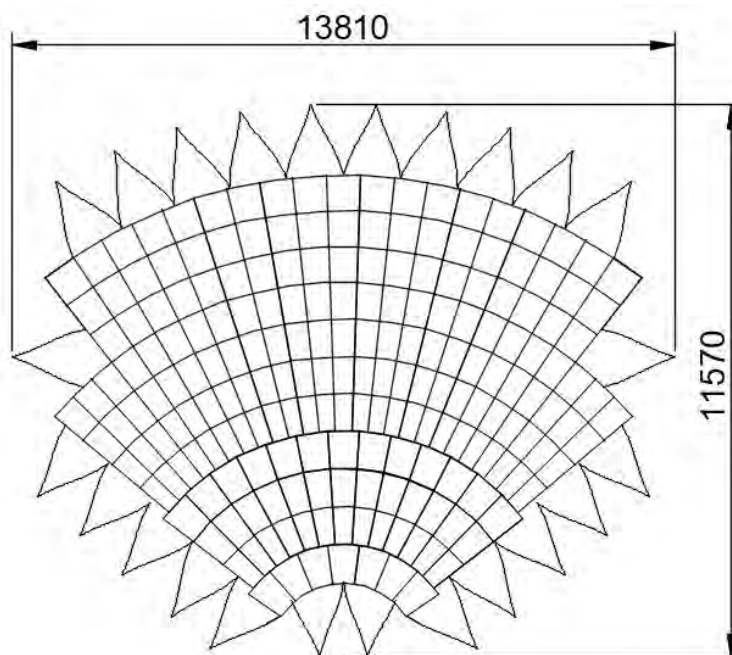


Рисунок 1 – Внешний вид зеркала коллиматора МАРК-12

Зеркало коллиматора МАРК-12 состоит из 203 прецизионных щитов. Неидеальность поверхности зеркала связана как с точностью изготовления щитов, так и с юстировкой щитов при настройке зеркала коллиматора. Целью юстировки зеркала является минимизация отклонения его поверхности от теоретической.

В рамках модернизации автоматизированного измерительного комплекса – компактного полигона - проведено расширение частотного диапазона измерений характеристик рассеяния объектов до 40,0 ГГц. В связи с этим потребовалась дополнительная юстировка поверхности зеркала коллиматора. Максимальные отклонения поверхности зеркала от теоретической должны быть не более 0,075 мм. Принято [2] состояние поверхности зеркала оценивать по значению среднеквадратичного отклонения (СКО). При нормальном законе распределения отклонений по доверительному интервалу 95% получаем, что максимальное значение СКО для щитов центральной зоны зеркала (проекция рабочей зоны на поверхность зеркала) должно составлять не более 0,038 мм.

Для измерения точности изготовления поверхности зеркала и его юстировки было разработано специализированное программное обеспечение для работы с лазерным трекером FARO Ion Xi. В результате юстировки для щитов центральной зоны СКО реальной поверхности зеркала составило 0,032 мм по доверительному интервалу 95%.

Проводилась юстировка не только щитов центральной зоны, но и практически всех щитов коллиматора за исключением четырех наиболее труднодоступных для настройки (по два крайних щита

в 8 и в 11 рядах). Таким образом, в результате работ по юстировке зеркала была получена подробная карта поверхности зеркала коллиматора МАРК-12. Наличие такой карты позволяет провести оценку вклада неидеальности поверхности зеркала коллиматора МАРК-12 в неравномерность распределения поля в рабочей зоне.

Поверхность зеркала коллиматора МАРК-12 и методы расчета распределения поля в его рабочей зоне

Для оценки влияния неидеальности поверхности зеркала коллиматора была разработана компьютерная модель поверхности. Основная часть зеркала коллиматора построена по точкам, полученным в результате сканирования поверхности зеркала. Массив данных содержит свыше 12 тысяч точек. В компьютерной модели фрагменты зеркала коллиматора, которые не были отсканированы с помощью лазерного трекера, являлись частью теоретической параболической поверхности.

На рисунке 2а представлена модель реального зеркала. Измеренные отклонения поверхности зеркала коллиматора МАРК-12 от теоретической показаны на рисунке 2б.

Оценка влияния точности изготовления поверхности зеркала может быть выполнена путем сравнения распределения поля в рабочей зоне моделей реального и теоретического зеркал, размещенных в свободном пространстве. Экспериментальным путем оценить влияние неидеальности невозможно, потому что всегда есть несоответствия полученной кромки зеркала и аналитической, есть влияние безэховой камеры, которая не может полностью поглотить помеховые сигналы.

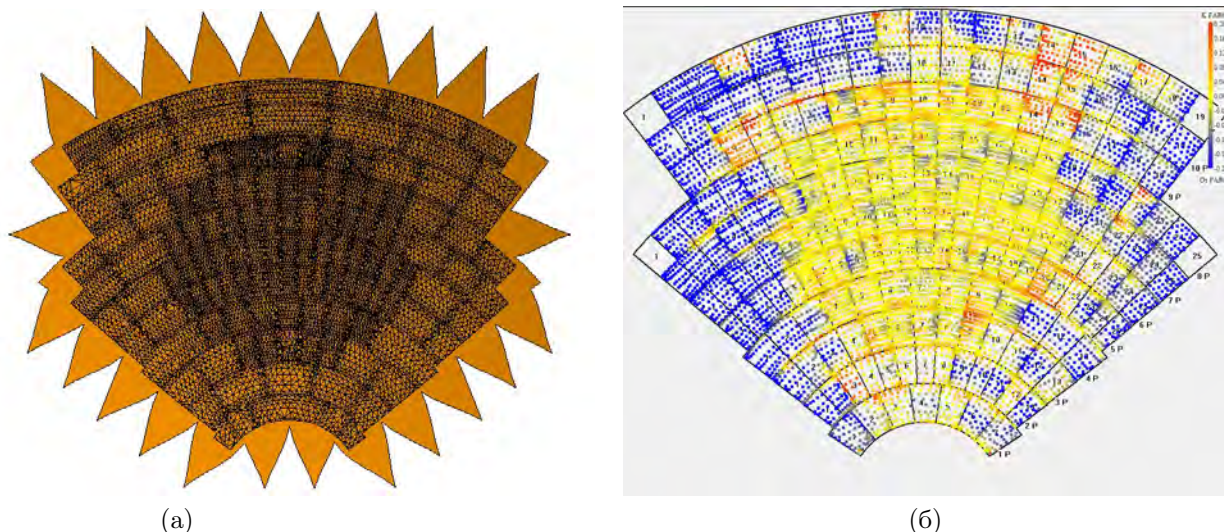


Рисунок 2 – Схематическое представление а) компьютерной модели и б) отклонения поверхности зеркала от теоретической

Расчет распределения поля в рабочей зоне коллиматора проводился в программе ФЕКО методом физической оптики. Метод физической оптики в данном случае дает результат близкий к точному в силу того, что размер зеркала составляет сотни длин волн. Компьютерная модель поверхности зеркала коллиматора представлена в формате, пригодном для импортирования в программу ФЕКО.

В качестве источника излучения использовался конический рупорный облучатель. Облучатель запитывался одномодовым волноводом, рассчитывалась его диаграмма направленности в передней полусфере. В фокус зеркала помещался уже не сам облучатель, а точечный источник с рассчитанной диаграммой направленности. Таким образом исключалось попадание излучения из облучателя в рабочую зону напрямую (без зеркала) и влияние переотражений между облучателем и зеркалом коллиматора на распределение поля в рабочей зоне.

Результаты расчета поля в рабочей зоне

Ниже представлены результаты расчета распределения поля в рабочей зоне моделей теоретического и реального коллиматоров МАРК-12 при вертикальной поляризации падающей волны.

При частоте излучения 3 ГГц (длина волны 10 см) неровности зеркала не влияют на распределение поля, что видно из представленных на рисунке 3 результатов расчета. Картины поля для теоретического

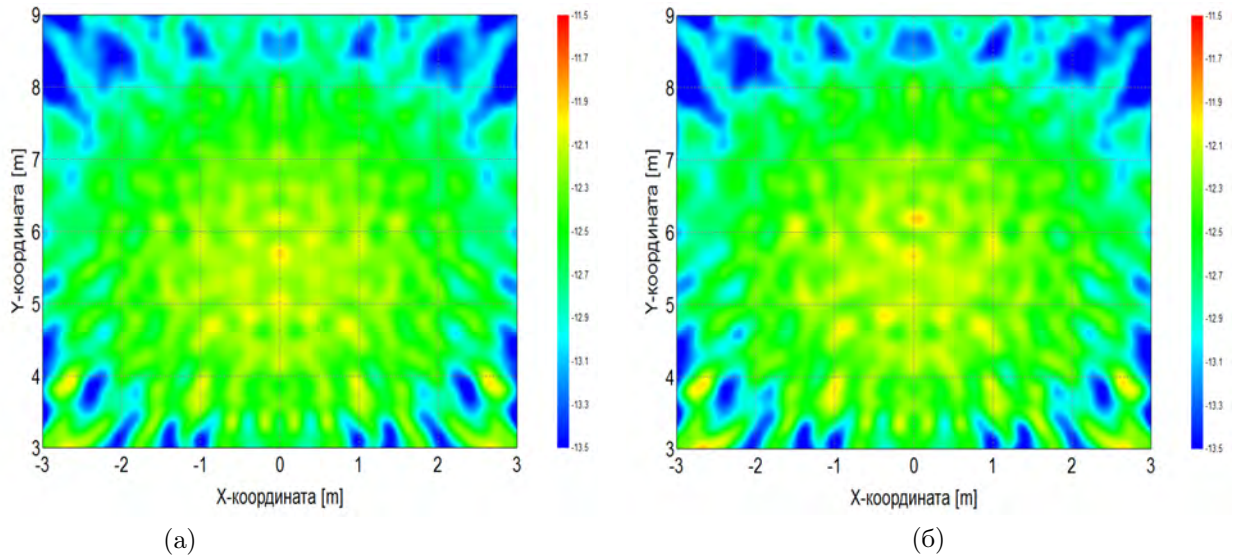


Рисунок 3 – Распределение амплитуды поля в центре рабочей зоны а) теоретического и б) реального коллиматора MARK-12 при частоте 3 ГГц

и реального зеркала отличаются мало, неравномерность распределения амплитуды поля определяется именно формой кромок зеркала, а не состоянием его поверхности.

С ростом частоты излучения влияние неровностей поверхности становится ощутимым. Так на частотах 10 ГГц и 15 ГГц двумерные картины поля для теоретического и реального зеркал уже отличаются визуально (рисунки 4 и 5, соответственно). На этих частотах влияние кромок зеркала уже заметно снижается, и неравномерность поля определяется в большей степени именно неидеальностью поверхности зеркала.

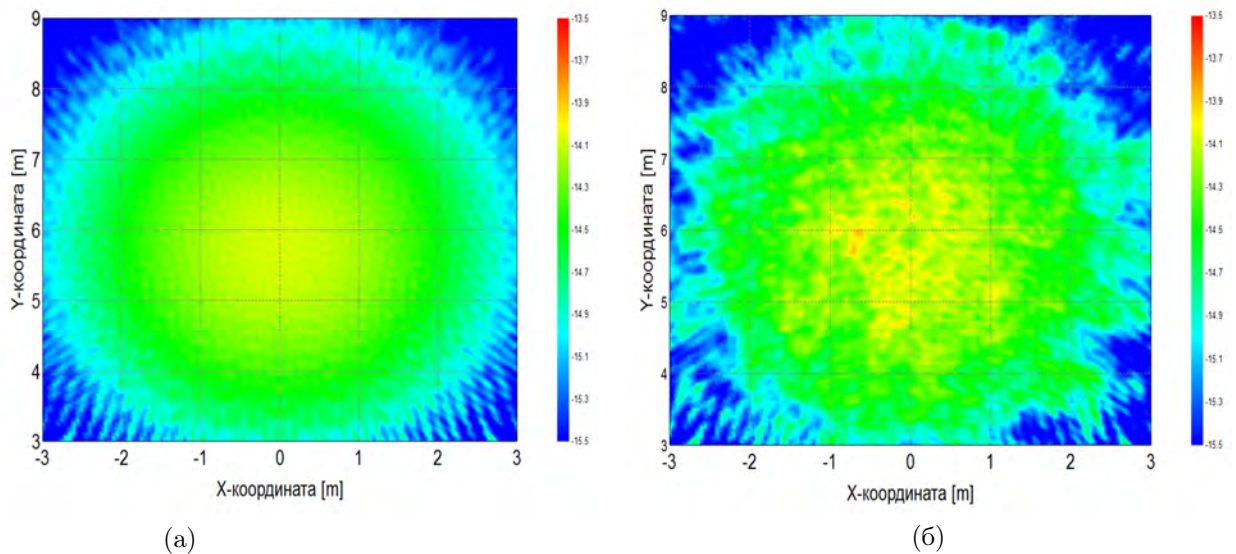


Рисунок 4 – Распределение амплитуды поля в центре рабочей зоны а) теоретического и б) реального коллиматора MARK-12 при частоте 10 ГГц

На графиках на рисунке 6 приведены для количественного сравнения зависимости распределения амплитуды и фазы поля в горизонтальном сечении, проходящем через центр рабочей зоны, для теоретического (синяя кривая) и реального (красная кривая) коллиматоров при частоте 10 ГГц.

Как видно из графиков, колебания поля в рабочей зоне реального зеркала носят несколько хаотический вид, причем амплитуда колебаний незначительно (0,2 дБ по амплитуде и 1^0 по фазе) отличается от колебаний поля в рабочей зоне теоретического зеркала. Это указывает на хорошо выполненную юстировку зеркала и соответствует критерию $\lambda/100$ для точности поверхности зеркала коллиматора.

Можно выделить влияние облучателя на неравномерность распределения поля в рабочей зоне.

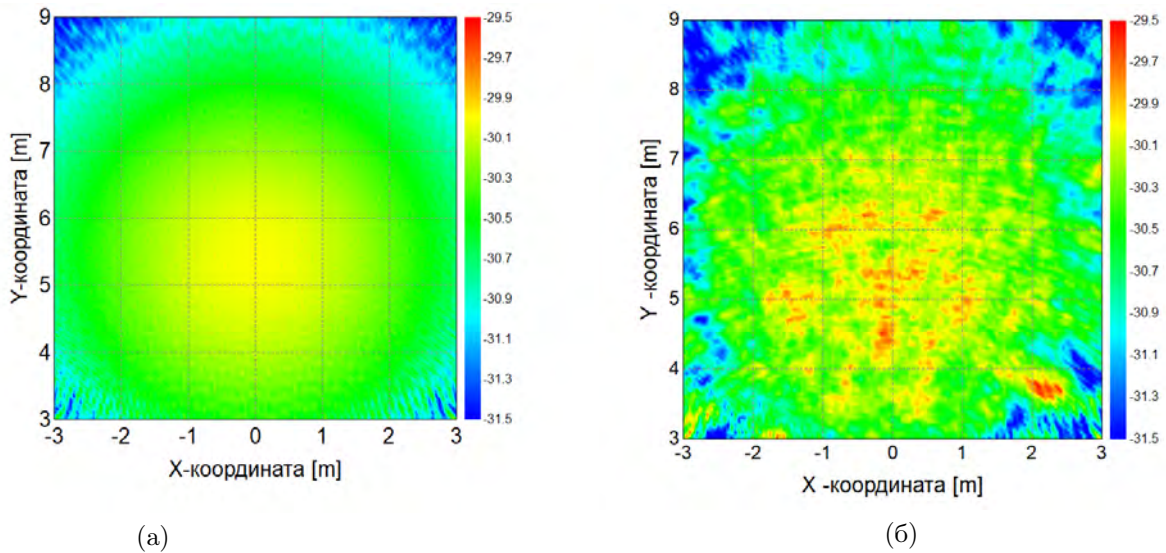


Рисунок 5 – Распределение амплитуды поля в центре рабочей зоны а) теоретического и б) реального коллиматора МАРК-12 при частоте 15 ГГц

В силу того, что для обеих поверхностей зеркала использовался один и тот же облучатель, плавно меняющаяся составляющая (taper) должна быть примерно одинаковой, а быстро меняющаяся составляющая (ripple) уже сильнее зависит от точности изготовления поверхности зеркала. Плавно меняющаяся составляющая неравномерности распределения поля имеет квадратичную зависимость от координаты, определяемую диаграммой направленности облучателя. Кромки зеркала одинаковые для обеих моделей, потому их влияние примерно равнозначно.

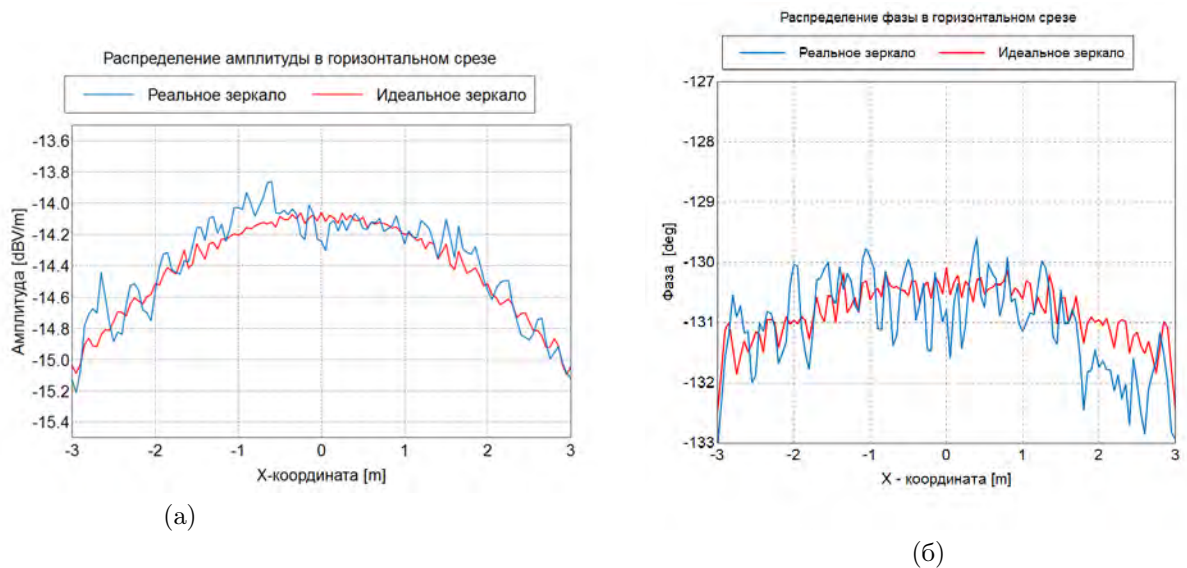


Рисунок 6 – Распределение а) амплитуды и б) фазы поля в центральном сечении рабочей зоны реального и теоретического коллиматора при частоте 10 ГГц

В Таблице 1 представлены значения неравномерности распределения амплитуды поля в рабочей зоне теоретического и реального коллиматоров для частот 3, 10 и 15 ГГц. Для двумерного распределения амплитуды поля построена параболическая аппроксимация, которая определяет плавно меняющуюся составляющую неравномерности поля. Максимальные изменения аппроксимирующих функций в рабочей зоне представлены в Таблице 1. Для получения быстро меняющейся составляющей неравномерности распределения поля из исходного двумерного распределения амплитуды вычитаем аппроксимирующую функцию. Принято использовать [3] доверительный интервал 95% для описания неравномерности поля, чтобы исключить случайные выбросы. Поэтому в таблице ниже полная и быстро меняющаяся составляющая неравномерности приведены с отбрасыванием самых плохих результатов.

Как видно из таблицы, полная неравномерность распределения амплитуды поля для теоретического зеркала немного уменьшается с ростом частоты, в то время как для реального зеркала такой

Таблица 1 – Неравномерность распределения амплитуды поля

Частота	Неравномерность распределения амплитуды поля	Теоретическое зеркало	Реальное зеркало
3 ГГц	полная (95%)	1,00 дБ	1,08 дБ
	плавно меняющаяся составляющая	0,73 дБ	0,77 дБ
	быстро меняющаяся составляющая (95%)	$\pm 0,45$ дБ	$\pm 0,49$ дБ
10 ГГц	полная (95%)	0,97 дБ	1,15 дБ
	плавно меняющаяся составляющая	1,01 дБ	1,05 дБ
	быстро меняющаяся составляющая (95%)	$\pm 0,18$ дБ	$\pm 0,34$ дБ
15 ГГц	полная (95%)	0,81 дБ	1,14 дБ
	плавно меняющаяся составляющая	0,68 дБ	0,73 дБ
	быстро меняющаяся составляющая (95%)	$\pm 0,26$ дБ	$\pm 0,50$ дБ

тенденции не наблюдается. Отличие в быстро меняющихся составляющих неравномерности распределения амплитуды поля для теоретического и реального зеркал увеличиваются с ростом частоты, что обусловлено неидеальностью поверхности зеркала.

Заключение

В работе проведена оценка влияния точности изготовления поверхности зеркала на неравномерность распределения поля в рабочей зоне коллиматора МАРК-12. Выполнено сравнение распределения полей, сформированных теоретическим и реальным зеркалом. Данные о профиле реального зеркала получены в результате прецизионного сканирования поверхности зеркала. Определены вклады в неравномерность распределения поля, обусловленные медленно и быстро меняющимися составляющими поля. Показана связь амплитуды быстро меняющейся составляющей и частоты. Сделан вывод, что критерий $\lambda/100$ для среднестатистического отклонения поверхности от точной (заданной) формы является достаточно обоснованным.

Список литературы

- [1] Johnson R.C., Ecker H.A., Moore R.A. Compact range techniques and measurements. IEEE Trans. on Anten. and Prop., 1969, V.17, N.5, P. 568.
- [2] Компактные полигоны для измерений характеристик рассеяния объектов. Балабуха Н.П., Зубов А.С., Солосин В.С. - М.: Наука, 2007. 266 с.
- [3] Knott E.F., Shaeffer J.F., Tuley M.T. Radar cross section. Boston: SciTech Publishing, 1993, second edition, 477 p.
- [4] T. Lee, W.D. Burnside. Performance Trade-Off Between Serrated Edge and Blended Rolled Edge Compact Range Reflectors. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, V. 44, No. 1, January 1996.
- [5] I. J. Gupta, K. P. Ericksen, W.D. Burnside. A Method to Design Blended Rolled Edges for Compact Range Reflectors. IEEE Transactions on Antennas and Propagation. V. 38, No. 6, June 1990.
- [6] C.A. Balanis. Antenna Theory. Analysis and Design. John Wiley & Sons. 2005.
- [7] D. Fasold. Measurement Performance of Basic Compact Range Concepts AMTA Conference 2006, pp.1-11.
- [8] A. M. Munos-Acevedo, M. Sierra-Castaner. An Efficient Hybrid GO-PWS Algorithm to Analyze Conformal Serrated-Edge Reflectors for Millimeter-Wave Compact Range. IEEE Transactions on Antennas and Propagation. V. 60, No. 2, February 2012.
- [9] Балабуха Н.П., Зубов А.С., Меньших Н.Л., Солосин В.С. Модернизация звездообразной кромки коллиматора МАРК-12. Современная электродинамика, №2 (4), апрель-май 2023, стр. 12-16.

**EVALUATION OF THE INFLUENCE OF IMPERFECTION
OF THE MARK-12 COLLIMATOR REFLECTOR SURFACE
ON THE FIELD DISTRIBUTION IN THE QUIET ZONE**

**Balabukha N.P.¹, Bulychev E.V.^{1*}, Zubov A.S.¹, Menshikh N.L.¹, Solosin V.S.¹,
Fedorov S.A.¹**

¹ Institute for Theoretical and Applied Electromagnetics of RAS, Moscow, Russia

* egor_itae@mail.ru

Abstract

The paper presents an analysis of the influence of the imperfection of the collimator reflector surface on the uneven distribution of the field in the quiet zone. The imperfection of the collimator reflector surface is called the deviation of the reflecting surface from the theoretical one. Based on the detailed studies of the structure of the reflector surface of the MARK-12 collimator located at ITAE RAS, a computer model of this reflector has been developed. Calculations of the uneven of the field distribution in the quiet zone of the collimator for the existing and theoretical reflector surfaces were carried out using the method of physical optics. The contributions of the taper (influence of the radiation pattern of the irradiator) and ripple components to the uneven distribution of the field in the quiet zone are determined.

Key words: compact range, reflector, quiet zone, field distribution, root mean square

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИГАНТСКОГО КОМБИНАЦИОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ МОЛЕКУЛ В СФЕРИЧЕСКОЙ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ОБОЛОЧКЕ

Иванов А.В. *¹, Сарычев А.К.¹, Бахолдин Н.В.², Быков И.В.¹, Рыжиков И.А.¹

¹ Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной электродинамики Российской академии наук, Москва, Россия

² Национальный исследовательский университет «МЭИ», Москва, Россия

Статья поступила в редакцию 11.07.2023

Одобрена после рецензирования 26.07.2023

Принята к публикации 31.07.2023

Аннотация

Проведено компьютерное моделирование излучения молекул, помещенных в металлическую оболочку. Модель качественно описывает усиление излучения от глобул белков, покрытых тонкой серебряной оболочкой. Модель позволяет рассчитать изменение сигнала гигантского комбинационного рассеяния (ГКР) в зависимости от толщины нанослоя металла поверх глобулы белка. Излучающий молекулярный диполь взаимодействует с металлической оболочкой и возбуждает поверхностные плазмоны. Плазмонные колебания достигают максимума, когда частота диполя близка к плазмонному резонансу металлической оболочки, а сам диполь находится вблизи плазмонной оболочки. Показано, что для различных радиусов полусфер существуют толщины серебряной оболочки, позволяющие возбудить дипольные, квадрупольные, октупольные и др. резонансы. При резонансной толщине оболочки моды электрического поля распространяются как по внутренней, так и по внешней границе серебряной оболочки, что приводит к дальнейшему усилению эффекта ГКР. Показано, что для глобул субмикронных размеров резонансное усиление излучения приходится на толщины серебряного покрытия в десятки нанометров, что соответствует толщине непрерывных пленок. Разработанная простая модель качественно описывает усиление ГКР от спайкового белка рецептор связывающего домена (RBD) коронавируса SARS-CoV-2, покрытого тонкой серебряной пленкой.

Ключевые слова: плазмонный резонанс, металлическая нанооболочка, усиление излучения, гигантское комбинационное рассеяние, рецептор связывающий домен, коронавирус SARS-CoV-2

EDN TNLWLM

DOI: 10.24412/2949-0553-2023-35-30-37

Введение

Спектроскопия гигантского комбинационного рассеяния (ГКР) является перспективным оптическим методом в области медицинской диагностики и уже сейчас обеспечивает сверхчувствительную детекцию вирусных частиц на физиологически значимых уровнях. В работах [1, 2] показано, что спектры ГКР гликопротеинов могут быть зарегистрированы с чувствительностью, позволяющей определить отдельные вирионы. Чувствительность ГКР спектроскопии во многом определяется морфологией ГКР-активной поверхности и пространственной ориентацией исследуемых молекул на этой поверхности.

Такие поверхности - ГКР-подложки со сложным регулярным профилем изготавливаются различными методами литографии, включая ионно-лучевую литографию, электронно-лучевую литографию, рентгеновскую литографию, наноимпринтинг и др. [3].

Среди многих методов литографии стоит отметить интерференционную литографию, которая позволяет производить регулярные ГКР-подложки в массовых масштабах и с большой площадью активной поверхности [4]. В работе [4] авторы развили аналитическую теорию плазмонов, возбуждаемых в металлодиэлектрических метаповерхностях, состоящих из модулированного диэлектрика, покрытого тонким слоем серебра. Такие металлодиэлектрические метаповерхности, выполняемые роль открытых

* Автор, ответственный за переписку: Андрей Валериевич Иванов, av.ivanov@physics.msu.ru

плазмонных резонаторов, изготавливались методом четырехлучевой интерференционной литографии и использовались для обнаружения 4-меркаптофенилбороновой кислоты (4-МФБК). Молекулы 4-МФБК образуют прочные дисульфидные связи с нанослоем серебра, тем самым обеспечивая максимальное сближение молекул с серебряной поверхностью.

Следует отметить большое количество работ по усилению сигнала комбинационного рассеяния (КР) регулярно упорядоченными или неупорядоченными сферическими частицами [5–18]. Частицы могут быть покрыты металлом, а в качестве сердцевинки используется диоксид кремния. В таких структурах могут возбуждаться мультипольные резонансы с высокой добротностью. В работе [19] изучались резонансы локализованных плазмонов полых металлических цилиндров в гигантском комбинационном рассеянии и генерации гигантской второй гармоники. Получены спектры ГКР белка лизоцима от пикограмма вещества. В этой работе в электростатическом приближении рассмотрено взаимодействие световой волны с бесконечным полым металлическим цилиндром и показано, что при условии возбуждения плазмонов локальное электрическое поле резонансно возрастает. В работе [20] авторы спроектировали сверхузкую металл-диэлектрическую нанополость из рецептор-связывающего домена (RBD) шиповидного (S) гликопротеина SARS-CoV-2 и серебряной поверхности. Белок RBD удерживался серебряной поверхностью за счет взаимодействия между восстановленными сульфгидрильными группами и серебром. Таким образом были получены характеристические спектры ГКР белка RBD прямым безметочным методом ГКР в концентрации менее 1 пг. Этой чувствительности достаточно для обнаружения антигенов вирусных белков на физиологически релевантных уровнях. Было показано, что сигнал ГКР от белка RBD можно увеличить на несколько порядков, покрыв пленку RBD серебряной оболочкой нанометровой толщины, повысив тем самым добротность резонатора. Это обеспечивает субфемтограммную чувствительность обнаружения вирусного антигена. Экспериментально показано, что белковые глобулы, покрытые серебром, могут вести себя как сферические металлдиэлектрические резонаторы, усиливающие комбинационное рассеяние.

В данной работе представлены результаты компьютерного моделирования излучения молекул, помещенных в металлическую оболочку. Модель качественно описывает усиление сигнала ГКР белковыми глобулами, покрытыми тонкой серебряной пленкой.

Электромагнитная дипольная модель излучения молекул

Для расчета усиления излучения от белка рецептор связывающего домена RBD SARS-CoV-2 в металлической оболочке воспользуемся простой моделью, в которой излучающий электрический диполь помещен внутри диэлектрической полусферы с показателем преломления 1.4, которая расположена на гладком оптически непрозрачном слое серебра и покрыта серебряной наноболочкой (Рис. 1).

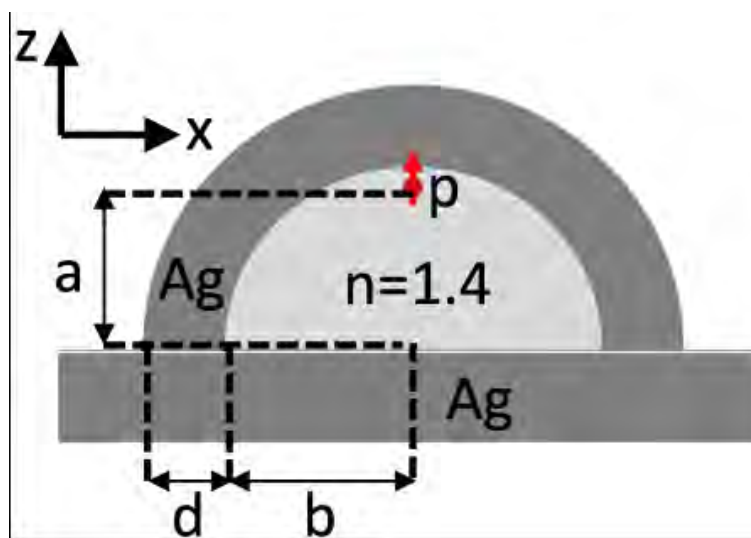


Рисунок 1 – Схематичное изображение излучающего электрического диполя внутри диэлектрической полусферы с показателем преломления 1.4, которая расположена на гладком оптически непрозрачном слое серебра и покрыта серебряной наноболочкой

Поскольку процесс комбинационного рассеяния является некогерентным, мы можем рассматривать только один диполь в оболочке. Расстояние от диполя до серебряной оболочки выбрано 1 нм. Эта конфигурация модели максимально точно описывает реальную глобулу белковых молекул, помещенных на серебряную поверхность и покрытую верхним слоем серебра, как это показано на Рис. 1. Электриче-

ские поля колеблющегося электрического точечного диполя в металлической оболочке были получены в программе COMSOL, которая решает полную систему уравнений Максвелла методом конечных элементов. Компоненты электрических полей рассчитывались с металлической оболочкой и без нее, соответственно, во всей области моделирования. Идеально согласованные слои (PML) использовались для моделирования бесконечных областей.

Рассчитано усиление плотности потока энергии электромагнитного поля S , излучаемого диполем, расположенным вблизи сферической серебряной оболочки на расстоянии 1 нм от ее внутренней поверхности, по отношению к плотности потока энергии электромагнитного поля S_0 , излучаемого диполем в вакууме. Усиление излучения S/S_0 в зависимости от толщины серебряной оболочки d при фиксированной длине волны $\lambda = 852$ и различных радиусах полусферы b показано на Рис. 2(а)-(б) (а - расстояние от центра полусферы до места расположения диполя).

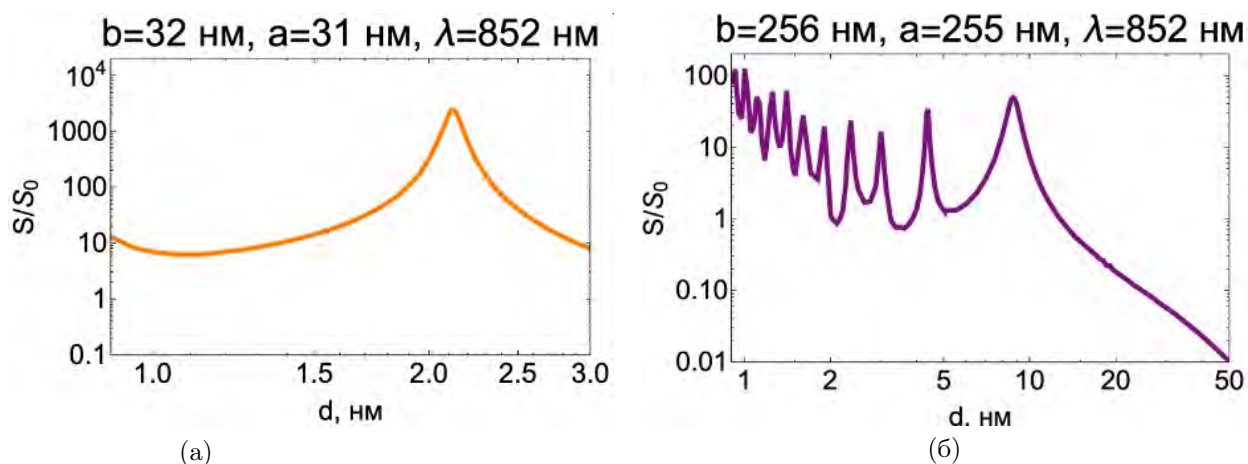


Рисунок 2 – Усиление излучения S/S_0 диполя, расположенного в верхней части серебряной оболочки (см. Рис. 1) на расстоянии 1 нм от оболочки в зависимости от толщины серебряной оболочки d для различных радиусов полусферы: (а) $b=32$ нм; (б) $b=256$ нм

Рассчитывалось среднее поверхностное значение S/S_0 по нормали к поверхности полусферы. Видно, что излучение S/S_0 резонансно усиливается как для малых радиусов полусфер, так и для больших радиусов полусфер при реальной толщине серебра порядка 10 нм. Предполагается, что длина волны 852 нм является длиной волны излучения, т.е. вторичного излучения при стоксовом сдвиге 1000 см^{-1} , относительно длины волны накачки 785 нм.

Излучение диполя частично отражается металлической оболочкой и возбуждает поверхностные плазмоны. Плазмонное излучение отражается сферой обратно и частично выходит за пределы металлической оболочки. Распределение электрического поля при резонансных толщинах серебра для полусферы радиуса 256 нм показано на Рис. 3. Хорошо видно, как электрическое поле резонансно возрастает при уменьшении толщины серебра и распространяется по всей поверхности полусферы. Интенсивность электрического поля достигает величины 10^6 для очень тонкой пленки серебра толщиной около 2 нм. Стоит отметить, что серебряная нанопленка толщиной менее 10 нм, полученная путем электронно-лучевого испарения в вакууме, может иметь островковую структуру, которая содержит кластеры серебра разного размера. В таком случае размер кластеров и расстояние между ними будет определять величину поля, возбуждаемого этими кластерами. Такая конфигурация белковых глобул с полунепрерывной, островковой серебряной пленкой остается предметом для дальнейшего исследования.

ГКР от рецептор связывающего домена RBD коронавируса SARS-CoV-2

Белок RBD является важной частью коронавируса SARS-CoV-2, поскольку этот белок образует «шипы», которыми вирус цепляется за поражаемую клетку. Современные лекарства, которыми пытаются лечить ковид, также взаимодействуют с белком RBD. Белок RBD наносился на серебряную подложку в соответствии процедурой, указанной в работе [20]. Подложку фиксировали серебряной ГКР-активной стороной вниз, параллельно плоскости нанесения капли раствора белка. Каплю белкового раствора (2 мкл) наносили на гидрофобно очищенную поверхность, закрепленную на предметном стекле. Затем ГКР-активная поверхность соприкасалась с каплей белкового раствора. Такой подход позволяет избежать растекание капли раствора в процессе инкубации. После инкубации в течение 5 минут образец промывали и высушивали. В результате такого подхода на подложке образовывались глобулы белка RBD с диаметром до 500 нм. Спектральные измерения проводились с помощью спектрометра комбина-

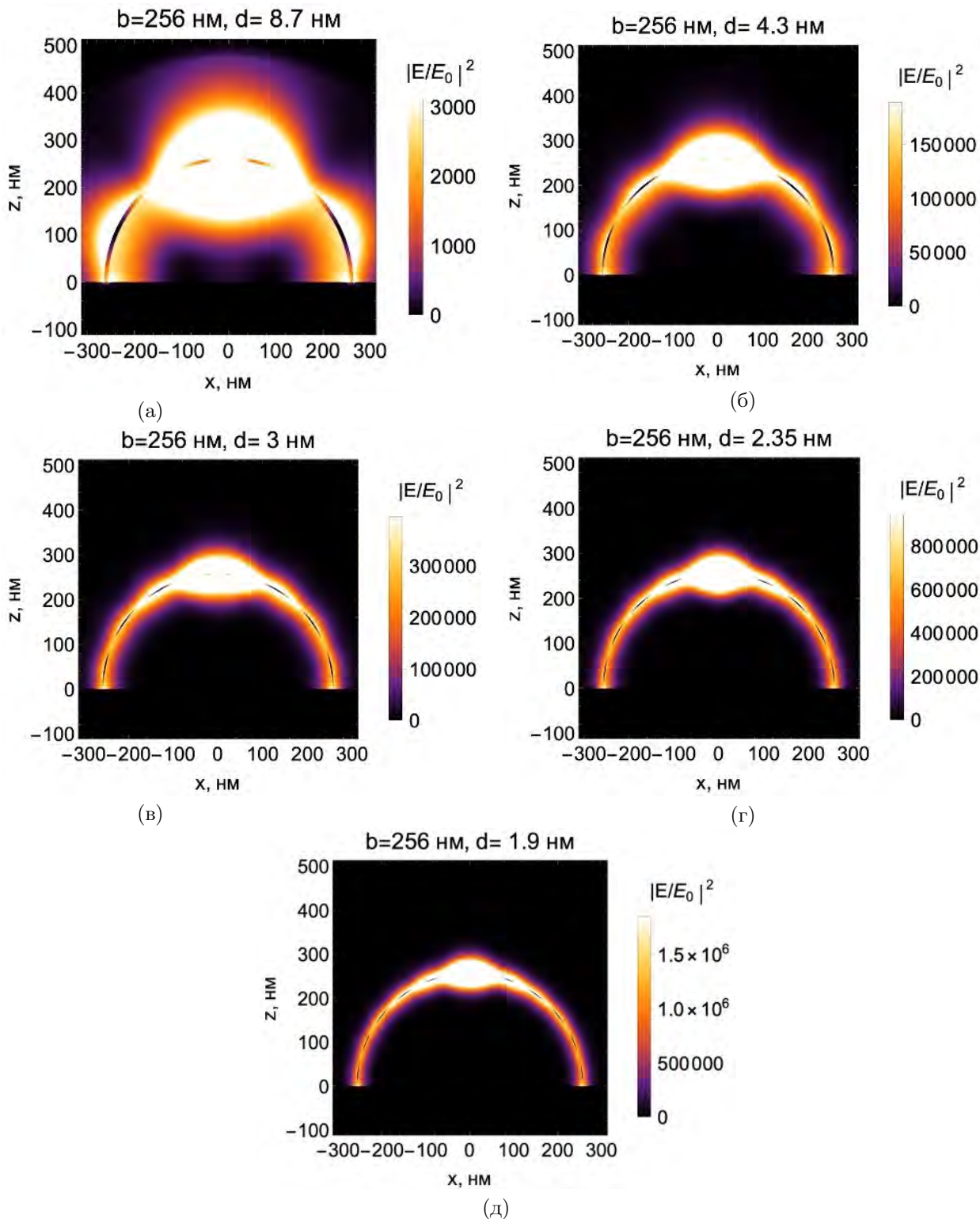


Рисунок 3 – Усиление излучения S/S_0 диполя, расположенного в верхней части серебряной оболочки (см. Рис. 1) на расстоянии 1 нм от оболочки в зависимости от толщины серебряной оболочки d для различных радиусов полусферы: (а) $b=32$ нм; (б) $b=256$ нм

ционного рассеяния WITec500 Alpha на базе конфокального микроскопа с опцией картирования, область картирования составляла 10×10 мкм. Для картирования использовался лазер с длиной волны 785 нм, мощностью 5-7 мВт и объективом 50X, время накопления сигнала составляло 0,5 с. Размер области, с которой снимался сигнал ГКР $\sim 10^6 \text{ нм}^3$, которая содержит \sim фемтограммы белка (Рис. 5). Получены характеристические ГКР спектры рецептор связывающего домена RBD коронавируса SARS-CoV-2, расположенного на поверхности серебра толщиной 100 нм и дополнительно покрытого слоем серебра толщиной 10 нм (Рис. 4). Картирование сигнала КР показано на Рис. 5. В спектрах преобладают пики аминокислот триптофана (776 см^{-1} , 1578 см^{-1}), фенилаланина (1012 см^{-1}), деформационные колебания связи C-H (1348 см^{-1}), амид I (1668 см^{-1}), амид III (1258 см^{-1}). Показано, что нанесение дополнительного слоя серебра поверх RBD приводит к усилению сигнала ГКР, что соответствует предложенной модели (Рис. 1 - 3). Кроме того, в некоторых случаях замечен сдвиг аналитического пика.

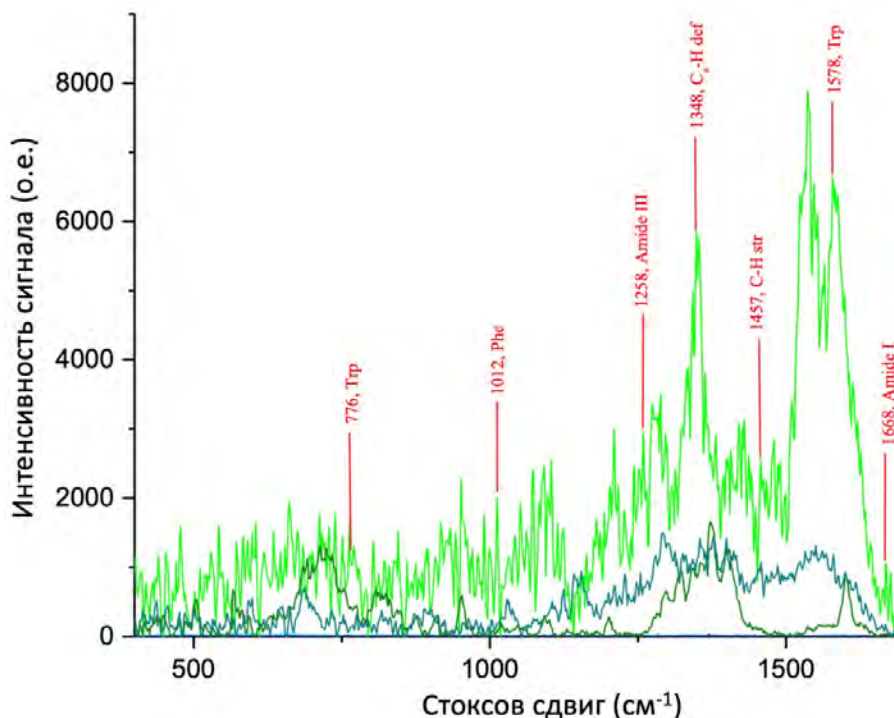


Рисунок 4 – Сигнал КР от белка RBD на поверхности серебра толщиной 100 нм. Ярко-зеленый и зеленый спектры соответствуют сигналу КР от RBD с дополнительным покрытием серебра толщиной 10 нм. Синий и голубой спектры (слабы выражены) соответствуют сигналу КР от RBD без дополнительного покрытия серебра. Красными отметками показаны характерные для RBD частоты колебания аминокислот триптофана, фенилаланина и др.

Заключение

Впервые выполнено компьютерное моделирование излучения молекул, помещенных в металлическую оболочку. Модель качественно описывает вторичное комбинационное излучение белковых глобул, покрытых тонкой серебряной пленкой. Модель позволяет рассчитать изменение сигнала ГКР в зависимости от толщины металлического нанослоя поверх белковой глобулы. Излучающий молекулярный диполь взаимодействует с металлической оболочкой и возбуждает поверхностные плазмоны. Плазмонные колебания достигают максимальной величины, когда частота диполя близка к частоте плазмонного резонанса металлической оболочки, а сам диполь расположен вблизи плазмонной оболочки. Эффективный диполь коллективного электронного колебания может быть много больше, чем молекулярный диполь, который усиливается сам по себе за счет классического эффекта ГКР. Таким образом, усиление излучения за счет металлической оболочки умножается на коэффициент усиления ГКР, обусловленный прямым взаимодействием молекулярного диполя с металлической поверхностью.

Получены характеристические ГКР спектры рецептор связывающего домена RBD коронавируса SARS-CoV-2, расположенного на поверхности серебра толщиной 100 нм и дополнительно покрытого слоем серебра толщиной 10 нм. Показано, что нанесение дополнительного слоя серебра поверх RBD приводит к усилению сигнала ГКР, что соответствует предложенной модели.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИТПЭ РАН.

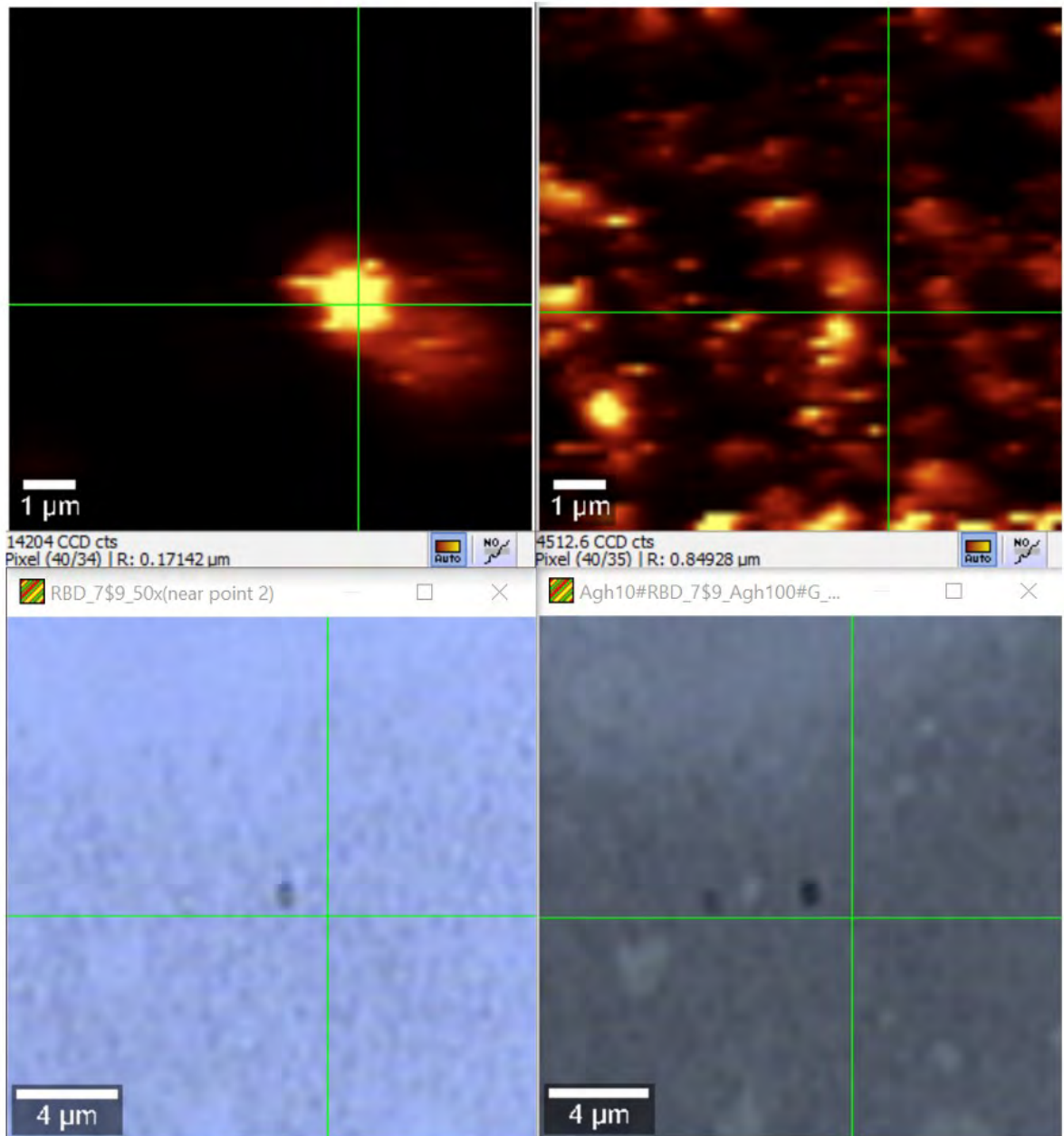


Рисунок 5 – Оптические фотографии и карты КР до нанесения поверхностного слоя серебра (слева) и после нанесения поверхностного слоя серебра (справа)

Список литературы

- [1] Феофанов, А. В., Олейников, В. А., Тузиков, А. Б., Януль, А. И., Крюков, Е. Ю., Бовин, Н. В., Набиев, И. Р., Исследование сиалированных неогликоконъюгатов метолом спектроскопии гигантского комбинационного рассеяния // Биоорганическая химия. – 1997. – № 23 (11). – С. 910-918.
- [2] Nechaeva, N. L., Boginskaya, I. A., Ivanov, A. V., Sarychev, A. K., Eremenko, A. V., Ryzhikov, I. A., Lagarkov, A. N., Kurochkin, I. N., Multiscale flaked silver SERS- Substrate for glycated human albumin biosensing // Anal. Chim. Acta. – 2020. – № 1100. – P. 250-257.
- [3] Barbillon, G., Ivanov, A., Sarychev, A. K., Application of Symmetry Breaking in Plasmonics // Symmetry. – 2020. – № 12 (896). – P. 1-16.
- [4] Sarychev, A. K., Ivanov, A., Lagarkov, A. N., Ryzhikov, I., Afanasev, K., Bykov, I., Barbillon, G., Bakholdin, N., Mikhailov M., Smyk, A., Shurygin A., Shalygin A., Plasmon Localization and Giant Fields in an Open- Resonator Metasurface for Surface-Enhanced- Raman-Scattering Sensors // Phys. Rev. Appl. – 2022. – № 17. – P. 044029-1-044029-16.
- [5] Moody, R. L., Vo-Dinh, T., Fletcher, W. H., Investigation of Experimental Parameters for Surface-Enhanced Raman Scattering (SERS) Using Silver-Coated Microsphere Substrates // Applied Spectroscopy. – 1987. – № 41(6). – P. 966–970.
- [6] Jackson, J. B., Halas, N. J., Silver Nanoshells: Variations in Morphologies and Optical Properties // J. Phys. Chem. B. – 2001. – № 105. – P. 2743–2746.
- [7] Bao, L. L., Mahurin, S. M., Liang, C. D., Dai, S., Study of silver films over silica beads as a surface-enhanced Raman scattering (SERS) substrate for detection of benzoic acid // Journal of Raman spectroscopy. – 2003. – № 34. – P. 394–398.
- [8] Vo-Dinh, T., Wang, H.-N., Scaffidi, J., Plasmonic nanoprobe for SERS biosensing and bioimaging. – 2010. – № 3. – P. 89-102.
- [9] Lin, W.-C., Liao, L.-S., Chen, Y.-H., Chang, H.-C., Tsai, D. P., Chiang, H.-P., Size Dependence of Nanoparticle-SERS Enhancement from Silver Film over Nanosphere (AgFON) Substrate // Plasmonics. – 2011. – № 6. – P. 201–206.
- [10] Wang, J. F., Wu, X. Z., Xiao, R., Dong, P. T., Wang, C. G., Performance-Enhancing Methods for Au Film over Nanosphere Surface-Enhanced Raman Scattering Substrate and Melamine Detection Application // Plos one. – 2014. – № 9(6). – P. 1–6.
- [11] Wu, M.-C., Lin, M.-P., Chen, S.-W., Lee, P.-H., Li, J.-H., Su, W.-F., Surface-enhanced Raman scattering substrate based on a Ag coated monolayer array of SiO₂ spheres for organic dye detection // RCS Advances. – 2014. – № 4. – P. 10043–10050.
- [12] He, R. H., Liang, R., Peng, P., Zhou, Y. N., Effect of the size of silver nanoparticles on SERS signal enhancement // Journal of Raman spectroscopy. – 2017. – № 19(267). – P. 1–10.
- [13] Romero-Cruz, L. A., Santos-Gomez, A., Palomino-Ovando, M. A., Hernandez-Cristobal, O., Sanchez-Mora, E., Gonzalez, A. L., Toledo-Solano, M., Surface enhanced Raman scattering due to interstitial gold nanoparticles into SiO₂ spheres array // Superlattices and Microstructures. – 2018. – № 123 – P. 71–80.
- [14] Newmai, M. B., Verma, M., Kumar, P. S., Monomer functionalized silica coated with Ag nanoparticles for enhanced SERS hotspots // Applied Surface Science. – 2018. – № 440 – P. 133–143.
- [15] Anjua, K. S., Gayathria, R., Subha, P. P., Rajeev Kumar, K., Jayaraj, M. K., Optimally distributed Ag over SiO₂ nanoparticles as colloidal SERS substrate // Microchemical Journal. – 2019. – № 147 – P. 349–355.
- [16] Huang, J., Zhou, Y.-f., Xu, J., Liang, P., Liu, Zu-g., Wang, J., Zhang, D., Dong, Q.-m., Shen, W.-m., Zhuang, S.-l., Unveiling the growth mechanism of SiO₂/Ag hybrid nanospheres and using for Surface Enhanced Raman Scattering detection // Applied Surface Science. – 2019. – № 463 – P. 115–120.
- [17] Wu, L., Zhang, W., Liu, C., Foda, M.-F., Zhu, Y., Strawberry-like SiO₂/Ag nanocomposites immersed filter paper as SERS substrate for acrylamide detection // Food Chemistry. – 2020. – № 328 – P. 127106.
- [18] Zhang, C., Xu, J., Chen, Y., Preparation of Monolayer Photonic Crystals from Ag Nanobulge-Deposited SiO₂ Particles as Substrates for Reproducible SERS Assay of Trace Thiol Pesticide // Nanomaterial. – 2020. – № 10(1205) – P. 1-13.
- [19] Kudelina, I. A., Murzina, T. V., Mchedlishvili, B. V., Oleynikov, V.A., Petukhov, A. V., Sokolov, K. V.,

Local-plasmon resonances of hollow metal cylinders used on surface enhanced Raman scattering and surface enhanced second-harmonic generation // *Physics, chemistry and mechanics of surfaces*. – 2020. – № 7(10) – P. 2474-2480.

- [20] Sarychev, A. K., Sukhanova, A., Ivanov, A. V., Bykov, I.V., Bakholdin, N.V., Vasina, D.V., Gushchin, V. A., Tkachuk, A. P., Nifontova G., Samokhvalov, P.S., Karaulov, A., Nabiev, I., Label-Free Detection of the Receptor- Binding Domain of the SARS-CoV-2 Spike Glycoprotein at Physiologically Relevant Concentrations Using Surface-Enhanced Raman Spectroscopy // *Biosensors*. – 2020. – № 12(300) – P. 1-20.
- [21] Lan J., Ge J., Yu J., Shan S., Zhou H., Fan S., Zhang Q., Shi X., Wang Q., Zhang L., Wang X., Lan J., Ge J., Yu J., Shan S., Zhou H., Fan S., Zhang Q., Shi X., Wang Q., Zhang L., Wang X., Structure of the SARS-CoV-2 spike receptor-binding domain bound to the ACE2 receptor // *Nature*. – 2020 – № 581, – P. 215-220.

COMPUTER SIMULATION OF RAMAN RADIATION OF MOLECULES IN SPHERICAL METAL SHELL

Ivanov A.V.^{1*}, Sarychev A.K.¹, Bakholdin N.V.², Bykov I.V.¹, Ryzhikov I.A.¹

¹ Institute for Theoretical and Applied Electromagnetics of RAS, Moscow, Russia

² Moscow Power Engineering Institute, National Research University, Moscow, Russia

* av.ivanov@physics.msu.ru

Abstract

Computer simulation of the radiation of molecules placed in a metal shell is performed. The model qualitatively describes amplification of the radiation from protein globules covered with a thin silver shell. The variation of surface-enhanced Raman scattering (SERS) signal is calculated as function of the thickness of the metal nanolayer deposited over a protein globule. The radiating molecular dipole interacts with the metal shell and excites surface plasmons. The plasmon oscillation reaches its maximum when the frequency of molecular dipole is close to the plasmon resonance of the metal shell, and the dipole itself is located near the plasmon shell. There is thickness of the silver shell hemispheres, which make it possible to excite dipole, quadrupole, octupole, and other plasmon resonances. At the resonant thickness, the electric field modes propagate both along the inner and outer boundaries of the silver shell, which results in the enhancement the SERS effect. It is shown that for submicron-sized globules, the resonant amplification of radiation falls on the silver coating thickness of tens of nanometers, which corresponds to the thickness of continuous films. The developed simple model qualitatively reproduces the enhancement of SERS from the SARS-CoV-2 receptor-binding domain (RBD) spike protein coated with a thin silver film.

Key words: plasmon resonance, metal shell, radiation amplification, giant Raman scattering, receptor binding domain, coronavirus SARS-CoV-2

ОПТИЧЕСКИЕ СЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ КРЕМНИЕВЫХ ДИСКОВЫХ РЕЗОНАТОРОВ

Иванов А.В. *¹, Быков И.В.¹, Барбийон Г.², Сарычев А.К.¹

¹ Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной электродинамики Российской академии наук, Москва, Россия

² EPF-Ecole d'Ingenieurs, Co, Франция

Статья поступила в редакцию 11.07.2023

Одобрена после рецензирования 26.07.2023

Принята к публикации 31.07.2023

Аннотация

Создана и изучается периодическая система дисковых резонаторов, выполненная из кристаллического кремния с поверхностным нанослоем серебра. Измеренные угловые зависимости коэффициента отражения от дисковых резонаторов демонстрируют глубокие провалы в видимом и инфракрасном диапазонах, причем слабо зависящие от угла падения. Измеренные спектры коэффициента отражения свидетельствуют о возбуждении в периодической системе дисковых резонаторов коллективных плазмонных колебаний, в том числе стоячих волн, усиливающих локальное электромагнитное поле. Проведены работы по измерению сигнала комбинационного рассеяния в системе кремниевых дисковых резонаторов. Сигнал комбинационного рассеяния в системе дисков на частоте возбуждения оптического фона кремния усилен более чем в 10^2 раз по отношению к сигналу на гладкой области образца. Результаты картирования сигнала комбинационного рассеяния косвенно демонстрируют распределение усиленных полей комбинационного рассеяния по поверхности системы дисковых резонаторов. Преимуществом предложенной системы дисковых резонаторов является возможность получить воспроизводимый стабильный сигнал комбинационного рассеяния на заданных частотах, которые можно варьировать изменением периода и диаметра дисков.

Ключевые слова: плазмонный резонанс, дисковые резонаторы, кремний, гигантское комбинационное рассеяние

EDN QQWGCX

DOI: 10.24412/2949-0553-2023-35-38-45

Введение

Гигантское комбинационное рассеяние (ГКР) является мощным аналитическим инструментом молекулярного анализа благодаря высокой чувствительности при обнаружении различных молекулярных комплексов [1]. Реализация эффекта ГКР требует создания резонансной плазмонной поверхности, усиливающей падающее электромагнитное поле. Современные технологии позволяют получать разнообразные плазмонные поверхности, включая регулярные, со сложной геометрией. К таким технологиям относятся сфокусированная ионно-лучевая литография [2], электронно-лучевая литография [3, 4], рентгеновская литография, УФ, плазмонная (PCL) и интерференционная литография [5, 6], литография наноимпринтом (NIL) [7], литография наносферами (NSL) [8], лазерно-индуцированный перенос металла [9]. Резонансные ГКР подложки представляют массивы металлических и диэлектрических наноструктур самой разной формы и, как правило, имеют металлическую ГКР-активную внешнюю поверхность для непосредственного контакта анализируемого вещества с этой поверхностью посредством химических связей. Форма и геометрия резонансных поверхностей определяют положение локализованных плазмонных резонансов и степень электромагнитного усиления ГКР, влияющего на чувствительность ГКР спектроскопии. Такие поверхности могут быть выполнены в виде регулярных массивов серебряных стержней [10], кремниевых гребенок с нанослоем серебра [11], золотых или гибридных золото-серебряных нанодисков с подслоем золота [4, 12], сверхузких нанощелей, образованных серебряными поверхностями [13, 14], нанопирамид кремния с золотыми частицами [15], наноотверстий [16], наноямок [17]

*Автор, ответственный за переписку: Андрей Валериевич Иванов, av.ivanov@physics.msu.ru

и др. Резонансные ГКР поверхности могут быть выполнены в виде островковых или шероховатых кластеров металлов, распределенных случайным образом [18, 19], однако такие структуры обладают ограниченной селективностью с позиции настройки положения резонансных частот на специфические стоксовые частоты анализируемых веществ. Кроме того, важна воспроизводимость, стабильность сигнала комбинационного рассеяния и отсутствие паразитных сигналов, включая люминесценцию.

В настоящей работе мы исследуем взаимодействие света с диэлектрической резонансной метаповерхностью, состоящей из периодических кремниевых дисков с тонким поверхностным слоем серебра. В такой структуре могут реализовываться металлodieлектрические резонансы в видимой и ближней инфракрасной областях спектра. Оптические потери в кремнии в видимой части спектра увеличиваются при уменьшении длины волны. Поскольку коэффициент усиления G сигнала ГКР приблизительно пропорционален четвертой степени локального электрического поля: $G \sim |E(r)/E_0|^4 \sim Q^4$ [20], для увеличения сигнала КР на четыре порядка достаточно иметь добротность $Q \sim n/k > 5$.

Разработка оптических сенсоров на основе кремниевых дисковых резонаторов

Оптические сенсоры изготовлены из периодически расположенных дисков, выполненных из кристаллического кремния Si(100). Основное преимущество использования кремния в роли базового материала заключается в том, что в нем практически отсутствует люминесценция при взаимодействии с оптическим излучением. Кроме того, показатель преломления кремния $n + ik$ для видимой области спектра велик, а потери малы, например, при длине волны $\lambda = 785$ нм вещественная часть показателя преломления $n = 3.7$, мнимая $k = 0.007$. Структуры были изготовлены с использованием высокоразрешающей электронно-лучевой литографии (установка Crestec CABL 9000C) и последующего ионного травления кремния (установка CORIAL 200I). Для того чтобы достичь требуемых размеров дисков и углублений, травление осуществлялось через слой электронного резиста ARP 6200.04 в газовой смеси SF₆ / Ar с высоким напряжением смещения. Резистивный слой предварительно подвергся воздействию ускоряющего напряжения 50 кВ и дозы облучения 160 мкКл/см², после чего обработан проявителем AR 600-546. На поверхность кремниевых структур был нанесен тонкий слой серебра толщиной ~ 30 нм методом электронно-лучевого испарения после удаления резиста. В итоге были изготовлены структуры с периодом 500 нм, диаметром дисков 350 нм, высотой 110 нм. Морфология структур с геометрическими параметрами представлена на Рис. 1.

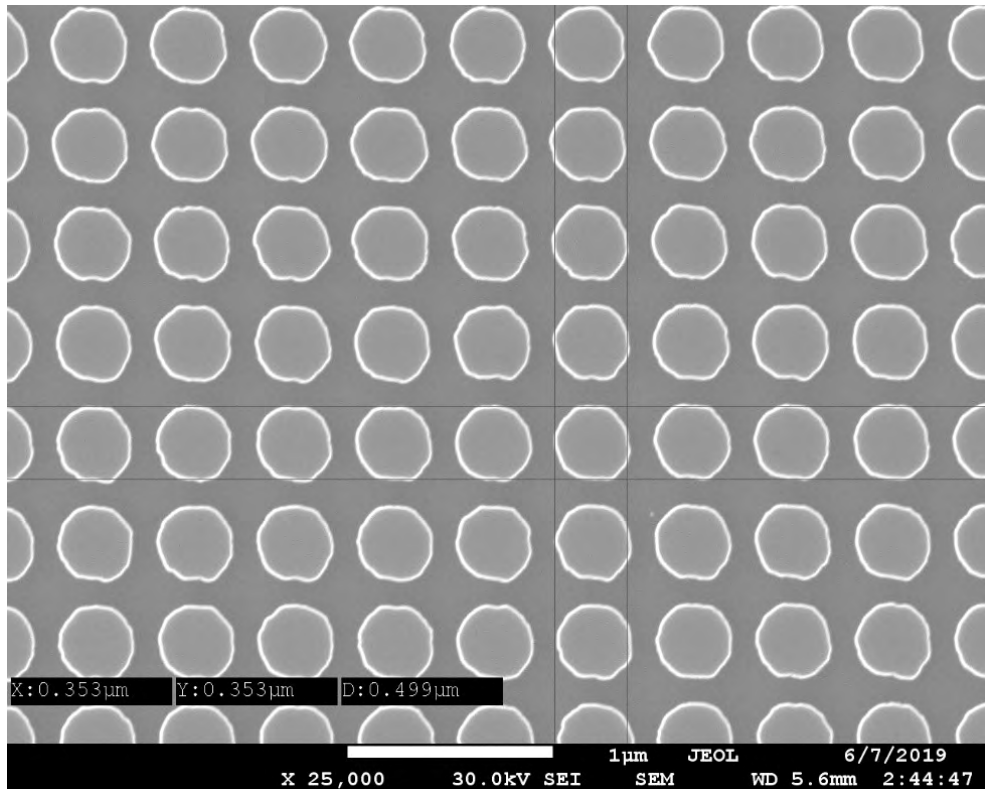


Рисунок 1 – Сканирующая электронная микроскопия (СЭМ) образца кремниевых дисков с периодом $D = 500$ нм, диаметром $d = 350$ нм

Коэффициент отражения от кремниевых дисковых резонаторов

Численные расчеты проведены методом конечных элементов в программе COMSOL. На Рис. 2 показаны результаты компьютерного моделирования коэффициента отражения R от длины волны при нормальном падении для структуры с периодом $D = 500$ нм, диаметром дисков $d = 350$ нм, толщине поверхностного слоя серебра $d_{Ag} = 35$ нм, высоте $h = 110$ нм. Хорошо видны плазмонные резонансы на длине волны 974 нм и 737 нм. Распределения напряженности электрического поля на резонансных длинах волн (974 нм и 737 нм) представлены на Рис. 3. Длинноволновый резонанс на 974 нм соответствует дипольному резонансу на границе верхнего слоя серебра и кремния.

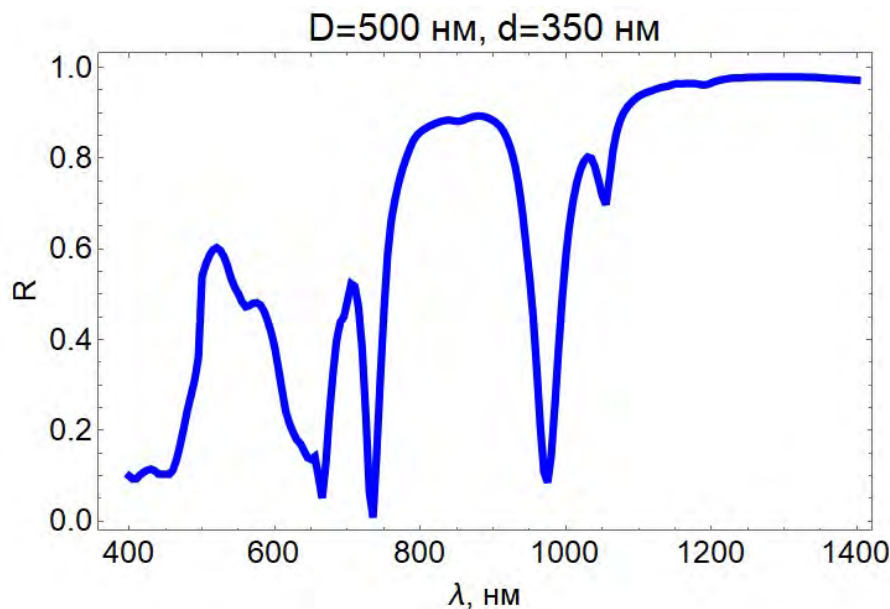


Рисунок 2 – Расчетный коэффициент отражения R от длины волны при нормальном падении для структуры с периодом $D = 500$ нм, диаметром дисков $d = 350$ нм

Проведен эксперимент по регистрации угловых зависимостей коэффициента отражения от поверхности сенсоров в диапазоне углов падения α от 20° до 70° при различных поляризациях падающего света (Рис. 4). Результаты экспериментов для угловых зависимостей коэффициента отражения демонстрируют минимумы в коэффициенте отражения, характеризующие аккумуляцию энергии поверхностью созданных образцов.

Экспериментальные измерения коэффициентов отражения для дисковых структур демонстрируют различные типы резонансов. Угловое положение наблюдаемых минимумов отражения в случае р-поляризации (R_p) определяется периодом структур вследствие дифракции, в то время как для s-резонансы (R_s) генерируется из-за возникновения стоячей волны в металлодиэлектрическом диске и практически не зависят от угла падения и периода структуры (Рис. 4).

Усиление локального электрического поля оптическими сенсорами на основе кремниевых дисковых резонаторов

Разработанные и созданные структуры выполнены из кремния, у которого имеется собственная характерная частота комбинационного рассеяния 527 см^{-1} . Эта частота соответствует возбуждению оптического фона в кремнии. Элементарная ячейка кремния имеет форму тетраэдра и содержит четыре атома, которые все вместе имеют 12 степеней свободы. Три степени свободы относятся к длинноволновым акустическим фононам, а оставшиеся 9 степеней свободы - это колебания атомов кремния внутри элементарной ячейки. Часть таких колебаний обладает дипольным моментом и взаимодействует с лазерным излучением. Это взаимодействие приводит к КР света. Наибольшую амплитуду имеет спектральная линия, которая имеет Стоксовский сдвиг $\sim 527 \text{ см}^{-1}$. Обнаруженные резонансы в спектрах коэффициента отражения от поверхности дисковых структур приводят к аккумуляции энергии структурами. С целью оценки эффективности созданной структуры для задач усиления сигнала КР проведены экспериментальные работы по созданию пространственных карт сигнала КР на стоксовой частоте кремния 527 см^{-1} . Регистрация спектров КР проведена с помощью спектрометра КР Wites 500 Alpha при возбуждении лазером 785 нм в режиме картирования. Другими словами измерялось локальное излучение на длине волны 820 нм большей, чем длина волны лазера 785 нм. Использован объектив 100x.

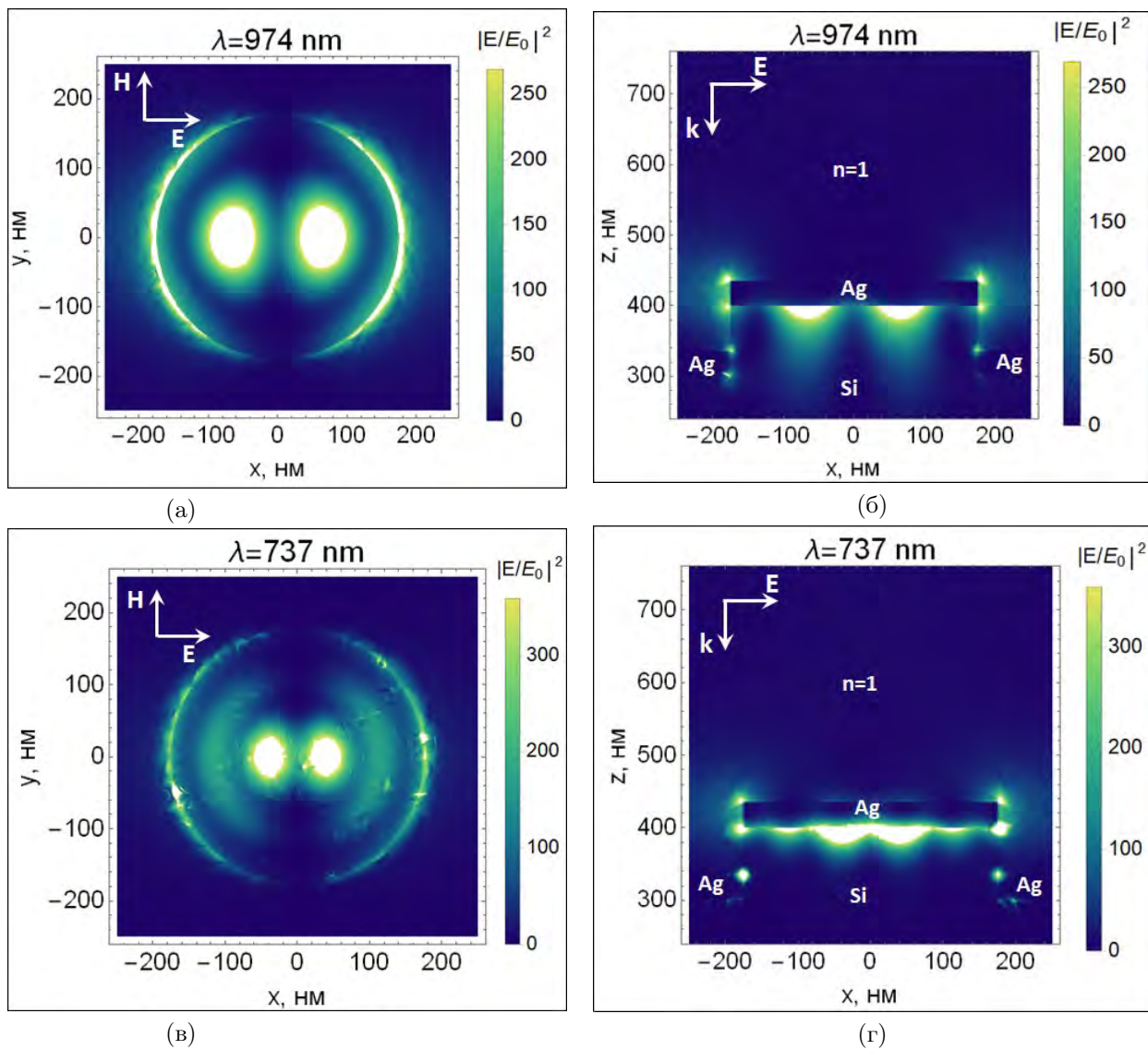
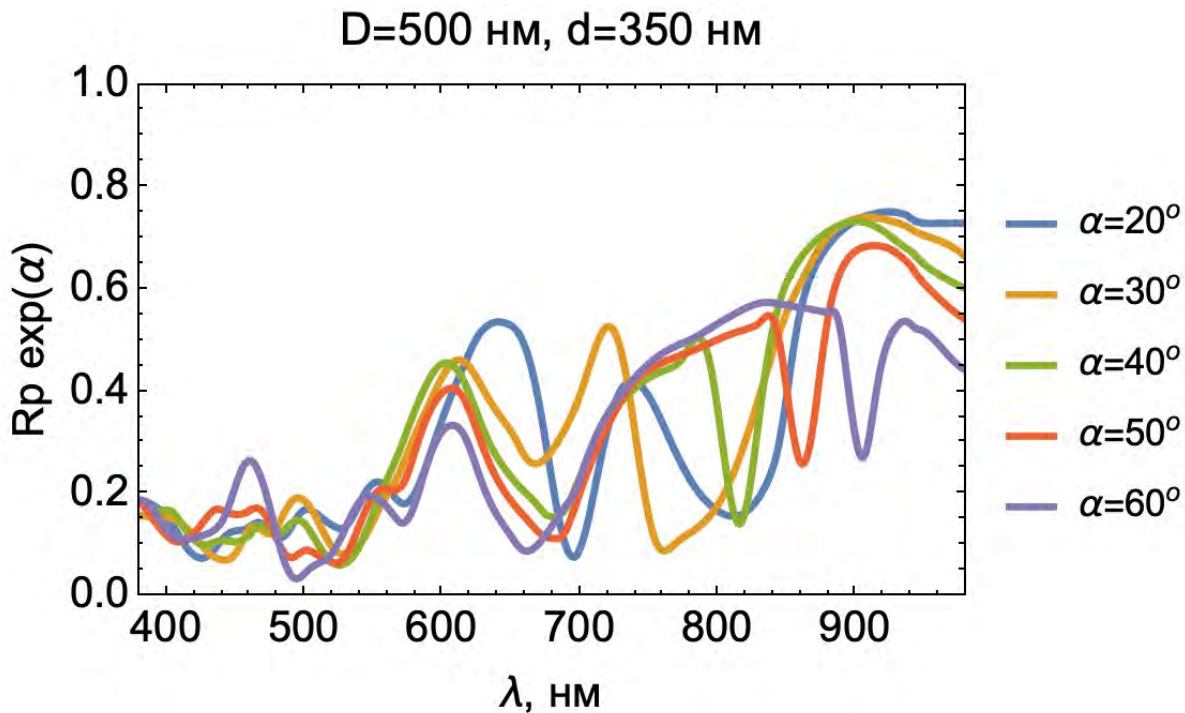
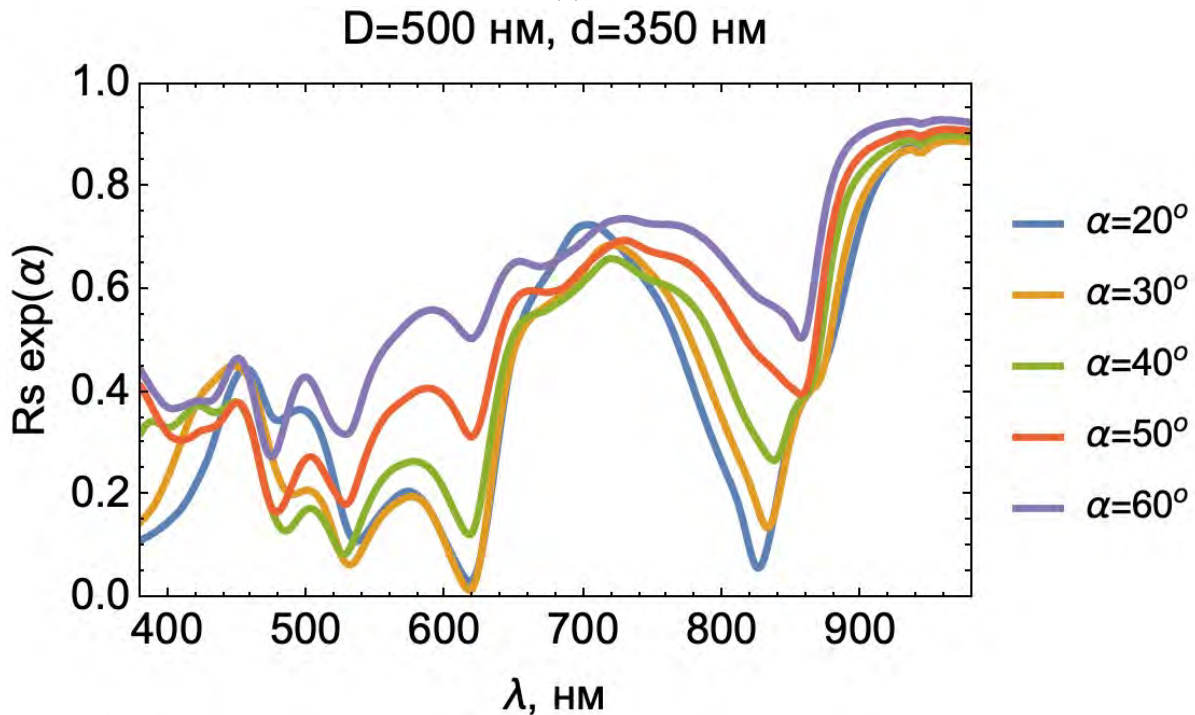


Рисунок 3 – Распределение интенсивности поля $|E/E_0|^2$ при дипольном резонансе на длине волны 974 нм (а,б) и квадрупольном на длине волны 737 нм (в,г); период дисков $D = 500$ нм, диаметр дисков $d = 350$ нм, толщина поверхностного слоя серебра $d_{Ag} = 35$ нм



(а)



(б)

Рисунок 4 – Экспериментальные угловые зависимости коэффициента отражения R от длины волны для поперечной и продольной поляризаций электромагнитной волны. Параметры: период $D = 500$ нм, диаметр дисков $d = 350$ нм, толщина поверхностного слоя серебра $dAg = 30$ нм

Мощность $P \sim 2 \text{ мВт}$. Спектры КР измерены в структурированных областях образцов (периодических дисков) и неструктурированных областях (пленки серебра) в качестве контроля. Сигнал КР в каждой точке карты получен путем интегрирования сигнала в диапазоне частот $510\text{--}550 \text{ см}^{-1}$ для «захвата» основной частоты кремния с учетом вычета базовой линии. Картирование проводилось по площади $20 \times 20 \text{ мкм}$ с шагом в 0.4 мкм . Результаты картирования представлены на Рис. 5. Относительное усиление сигнала комбинационного рассеяния для дисковых резонаторов (по отношению к гладкой области образца) достигает значения в 10^2 раз. На Рис. 5 отчетливо отображается профиль поверхности структуры. Фактически можно наблюдать координатное распределение усиления локального поля комбинационного рассеяния, создаваемого дисковыми резонаторами. Мы полагаем, что этот результат можно рассматривать как свидетельство локального характера явления ГКР, по крайней мере, в случае системы плазмонных резонаторов. Возможно, каждое колебание элементарной ячейки кремния взаимодействует с локальным электрическим полем независимо или радиус синхронизации ξ_s различных колебаний меньше диаметра дискового резонатора $\sim 500 \text{ нм}$. Вопрос о величине и зависимости радиуса синхронизации ξ_s от параметров системы нуждается в дальнейшем изучении.

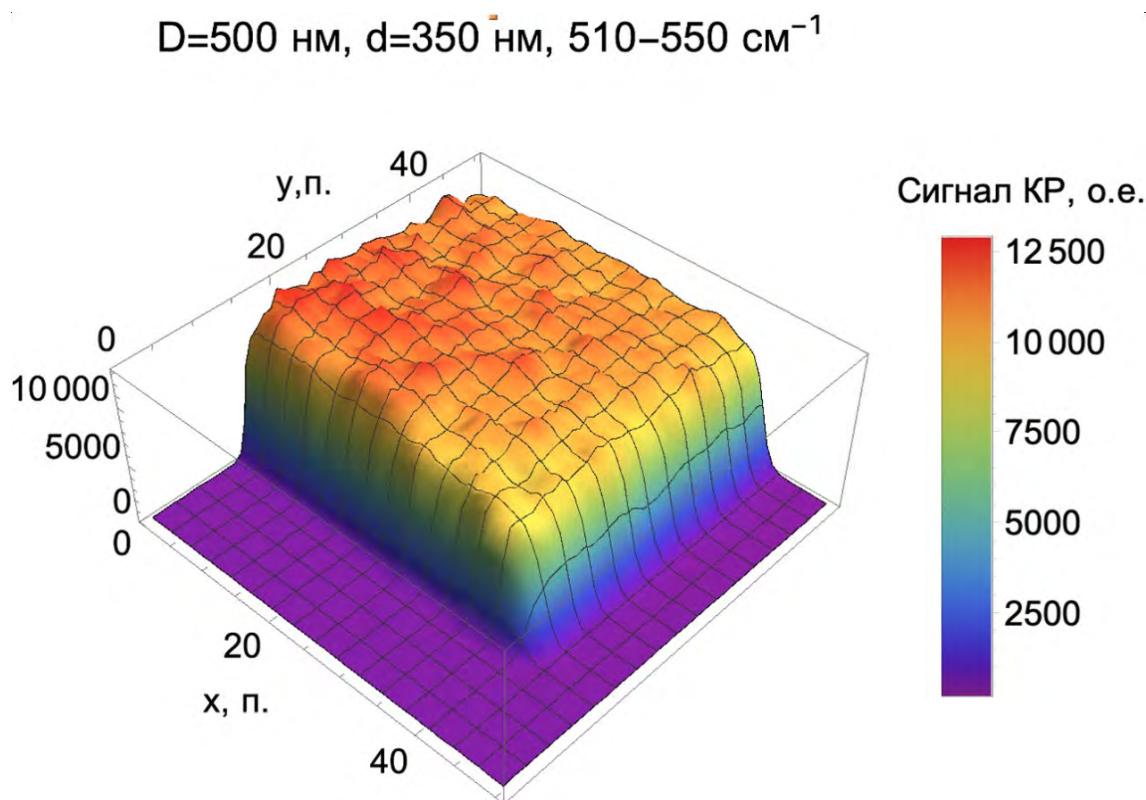


Рисунок 5 – Интегральный сигнал КР в диапазоне частот $510\text{--}550 \text{ см}^{-1}$, в структурированной и гладкой области образца. Масштаб: 1 пиксель = 0.4 мкм . Параметры: период $D = 500 \text{ нм}$, диаметр дисков $d = 350 \text{ нм}$, толщина поверхностного слоя серебра $d\text{Ag} = 30 \text{ нм}$

Заключение

Исследованы оптические свойства резонаторной метаповерхности на основе кремния, с нанесенным на поверхность кремния тонким нанослоем серебра. Результаты физических экспериментов и компьютерного моделирования продемонстрировали возбуждение металлодиэлектрических резонансов, что проявляется в провалах в спектрах углового отражения. Возбуждение резонансов соответствует исчезновению первого порядка дифракции и определяется периодом решетки и углом падения света. Возбужденные в металлодиэлектрической системе резонансы коррелируют с аномалиями Вуда, связанными с возбуждением поверхностных волн в результате дифракции. Резонансы могут быть настроены на необходимые длины волн изменением формы, геометрических параметров и расположения периодических элементов на поверхности, а также угла падения света. С целью оценки эффективности созданной структуры для задач усиления сигнала КР проведены экспериментальные работы по созданию пространственных карт сигнала КР на стоксовой частоте кремния. Относительное усиление сигнала комбинационного рассеяния для дисковых резонаторов (по отношению к гладкой области образца) достигает значения в 10^2 раз. Мы демонстрируем на примере системы периодических плазмонных резонаторов, что явление гигантского комбинационного рассеяния может иметь локальный характер. В

работе вводится понятие радиуса синхронизации.

Электронно-лучевая литография выполнена в ЦКП МФТИ.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИТПЭ РАН.

Список литературы

- [1] Sarychev, A. K., Ivanov, A., Lagarkov, A., Barbillon, G., Light concentration by metal-dielectric micro-resonators for SERS sensing // *Materials*. – 2019. – № 12 (103). – P. 1-39.
- [2] Henzie, J., Lee, J., Lee, M. H., Hasan, W., Odom, T. W., Nanofabrication of plasmonic structures // *Annu Rev Phys Chem*. – 2009. – № 60. – P. 147-165.
- [3] Yu, Q., Guan, P., Qin, D., Golden, G., Wallace, P.M., Inverted Size Dependence of Surface Enhanced Raman Scattering on Gold Nanohole and Nanodisk Arrays // *Nano Letters*. – 2008. – № 8. – P. 1923-1928.
- [4] Barbillon, G., Ivanov, A., Sarychev, A.K., SERS Amplification in Au/Si Asymmetric Dimer Array Coupled to Efficient Adsorption of Thiophenol Molecules // *Nanomaterials*. – 2021. – № 11(6). – P. 1-10.
- [5] Zhang, P., Yang, S., Wang, L., Zhao, J., Zhu, Z., Liu, B., Zhong, J., Sun, X. Large-scale uniform Au nanodisk arrays fabricated via x-ray interference lithography for reproducible and sensitive SERS substrate // *Nanotechnology*. – 2014. – № 25 (24). – P. 245301.
- [6] Gong, T., Luo, Y., Zhao, C., Yue, W., Zhang, J., Zhu, Y., Pu, M., Zhuojun, Z., Wang, C., Luo, X. Highly reproducible and stable surface-enhanced Raman scattering substrates of graphene-Ag nanohole arrays fabricated by sub-diffraction plasmonic lithography // *OSA Continuum*. – 2019. – № 2(3). – P. 582-594.
- [7] Ding, T., Sigle, D. O., Herrmann, L. O., Wolverson, D., Baumberg, J. J. Nanoimprint lithography of Al Nanovoids for Deep-UV SERS // *ACS Appl. Mater. Interfaces*. – 2014. – № 6 (20). – P. 17358-17363.
- [8] Masson, J. F., Gibson, K. F., Provencher-Girard, A. J. Surface-Enhanced Raman Spectroscopy Amplification with Film over Etched Nanospheres // *J. Phys. Chem. C*. – 2010. – № 114 (51). – P. 22406-22412.
- [9] Kuznetsov, A. I., Kiyan, R., Chichkov, B. N. Laser fabrication of 2D and 3D metal nanoparticle structures and arrays // *Optics Express* – 2010. – № 18 (20). – P. 21198-21203.
- [10] Ivanov, A., Shalygin, A., Lebedev, V., Vorobev, P., Vergiles, S., Sarychev, A. K. // *Appl. Phys. A*. – 2012. – № 107. – P. 17-21.
- [11] Сарычев, А. К., Иванов А. В., Афанасьев, К. Н., Быков, И. В., Богинская И. А., Курочкин, И. Н., Лагарьков, А. Н., Мерзлякин, А. М., Михеев, В. В., Негров, Д. В., Рыжиков, И. А., Седова, М. В. // *Квантовая электроника*. – 2018. – № 48 (12). – P. 1147-1152.
- [12] Barbillon, G., Ivanov, A., Sarychev, A.K., Hybrid Au/Si Disk-Shaped Nanoresonators on Gold Film for Amplified SERS Chemical Sensing // *Nanomaterials*. – 2019. – № 9 (1588) – P. 1-12.
- [13] Сарычев, А. К., Иванов А. В., Барбильон, Г. // *Квантовая электроника*. – 2021. – № 51 (1) – P. 1-5.
- [14] Sarychev, A. K., Sukhanova, A., Ivanov, A. V., Bykov, I.V., Bakholdin, N.V., Vasina, D.V., Gushchin, V. A., Tkachuk, A. P., Nifontova G., Samokhvalov, P.S., Karaulov, A., Nabiev, I., Label-Free Detection of the Receptor- Binding Domain of the SARS-CoV-2 Spike Glycoprotein at Physiologically Relevant Concentrations Using Surface-Enhanced Raman Spectroscopy // *Biosensors*. – 2020.– № 12(300) – P. 1-20.
- [15] Lagarkov, A., Boginskaya, I., Bykov, I., Budashov, I., Ivanov, A., Kurochkin, I., Ryzhikov, I., Rodionov, I., Sedova, M., Zverev, A., Sarychev, A. K. // *Optics Express*. – 2017.– № 25(15) – P. 17021-17038.
- [16] Mahigir, A., Chang, T.-W., Behnam, A., Liu, G. L., Ranjan, G., Veronis, G. Plasmonic nanohole array for enhancing the SERS signal of a single layer of graphene in water // *Sci. Rep*. – 2017.– № 7(14044) – P. 1-9.
- [17] Sarychev, A. K., Ivanov, A., Lagarkov, A. N., Ryzhikov, I., Afanasev, K., Bykov, I., Barbillon, G., Bakholdin, N., Mikhailov M., Smyk, A., Shurygin A., Shalygin A., Plasmon Localization and Giant Fields in an Open-Resonator Metasurface for Surface-Enhanced- Raman-Scattering Sensors // *Phys. Rev. Appl*. – 2022. – № 17. – P. 044029-1-044029-16.
- [18] Lee, J., Hua, B., Park, S., Ha, M., Lee, Y., Fan, Z., Ko, H., Tailoring surface plasmons of high-density gold nanostar assemblies on metal films for surfaceenhanced Raman spectroscopy // *Nanoscale*. – 2013. – № 17 (6). – P. 616-623.
- [19] Nechaeva, N. L., Boginskaya, I. A., Ivanov, A. V., Sarychev, A. K., Eremenko, A. V., Ryzhikov, I.

A., Lagarkov, A. N., Kurochkin, I. N., Multiscale Flaked Silver SERS-substrate for Glycated Human Albumin Biosensing // *Analytica Chimica Acta.*– 2020. – № 1100. – P. 250-257.

[20] Boyarintsev, S. O., Sarychev, A. K., Computer simulation of surface-enhanced Raman scattering in nanostructured metamaterials. – 2011. – № 113 (6). – P. 963-971.

OPTICAL SENSORS BASED ON SILICON DISKS RESONATORS

Ivanov A.V.^{1*}, Bykov I.V.¹, Barbillon G.², Sarychev A.K.¹

¹ Institute for Theoretical and Applied Electromagnetics of RAS, Moscow, Russia

² EPF-Ecole d'Ingenieurs, 3 bis rue Lakanal, France

* av.ivanov@physics.msu.ru

Abstract

A periodic system of disk resonators is researched and developed. The system is made of crystalline silicon with a surface nanolayer of silver. The measured angular dependences of the reflectance of the disk resonators demonstrate deep dips in a wide range of the visible and infrared spectral ranges. The spectrum of the reflectance weakly depends on the angle of incidence. The measured reflectance spectra indicate the excitation of collective plasmon oscillations in the periodic system of disk resonators, including standing waves that amplify the local electromagnetic field. Work has been carried out to measure the Raman signal in a system of silicon disk resonators. The Raman scattering signal in the system of disks at the excitation frequency of the silicon optical phonon is amplified by more than 10^2 times with respect to the signal on the smooth region of the sample. The results of mapping the Raman signal indirectly demonstrate the distribution of amplified local fields over the entire surface of the system of disk resonators. The advantage of the proposed system of disk resonators is ability to obtain a reproducible stable Raman signal at given frequencies, which can be varied by changing the period and the diameter of the disks.

Key words: plasmon resonance, disk resonators, silicon, SERS
