

Հայաստանի ԳԱԱ
Տեղեկագիր.

ՖԻԶՄԱԿ
ФИЗИКА

1993

Журнал издается с 1966 г.
Выходит 6 раз в год
на русском, армянском и английском языках.

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Вл. М. Арутюнян, главный редактор
Э. Г. Шароян, зам. главного редактора
Вил. М. Арутюнян
А. А. Ахумян
Г. А. Вартапетян
Э. М. Казарян
А. О. Меликян
А. Р. Мкртчян
В. О. Папанян
А. А. Мирзаханян, ответственный секретарь

ԽՄԲԱԳՐԱԿԱՆ ԿՈՒՆԳԻՍ

Վլ. Մ. Հարությունյան, գլխավոր խմբագիր
Է. Գ. Շարոյան, գլխավոր խմբագրի տեղակալ
Վիլ. Մ. Հարությունյան
Ա. Ա. Հախումյան
Հ. Հ. Վարդապետյան
Է. Մ. Ղազարյան
Ա. Հ. Մելիքյան
Ա. Ռ. Մկրտչյան
Վ. Օ. Պապանյան
Ա. Ա. Միրզախանյան, պատասխանատու քարտուղար

EDITORIAL BOARD

Vl. M. Aroutiounian, editor-in-chief
E. G. Sharoyan, associate editor
Vil. M. Harutyunyan
A. A. Hakhumyan
H. H. Vartapetian
E. M. Kazarian
A. O. Melikyan
A. R. Mkrtchyan
V. O. Papanyan
A. A. Mirzakhanyan, executive secretary

Адрес редакции: Республика Армения, 375019,
Ереван, пр. Маршала Баграмяна, 24-г.

Խմբագրության հասցեն՝ Հայաստանի Հանրապետություն,
375019, Երևան, Մարշալ Բաղրամյան պող., 24-գ:

Editorial address: 24-g, Marshal Bagramyan Av.,
Yerevan, 375019, Republic of Armenia.

О ПРЕДЕЛАХ ПРИМЕНИМОСТИ МЕТОДА МАСЛОВА

А. А. АСАТЯН

Ереванский государственный университет

Ю. А. КРАВЦОВ

Институт общей физики АН РФ

(Поступила в редакцию 24 февраля 1993 г.).

Рассматривается вопрос о пределах применимости метода Маслова, формулируются достаточные условия применимости метода. Полученные результаты иллюстрируются на примере распространения гауссова пучка.

В теории волновых процессов описание распространения монохроматических волн обычно сводится к решению уравнения Гельмгольца. [1]

$$\Delta U + k^2 U = 0, \quad (1)$$

где $k = 2\pi/\lambda$ — волновое число. Одним из приближенных методов решения уравнения Гельмгольца (1) является метод Маслова [2, 3]. Несмотря на широкое применение метода [4—8], обычно при расчетах приводят условие применимости метода в виде

$$r_1 = 1/kL \ll 1, \quad (2)$$

где L — минимальный из характерных масштабов задачи. Очевидно, что условие (2) не дает четкого критерия применимости метода.

Цель данной работы — сформулировать достаточные условия применимости метода Маслова.

Типичная постановка задачи в теории волн формулируется в следующем виде: в плоскости $z=0$, $x=\xi$ задано начальное распределение поля

$$U_0(\xi) = A_0(\xi) \exp\{ik\psi_0(\xi)\}, \quad (3)$$

где $A_0(\xi)$ — начальное распределение амплитуды поля, а $\psi_0(\xi)$ — начальная фаза поля. Необходимо определить величину волнового поля в плоскости $z=z_p > 0$ (рис. 1).

Следуя работам [4—8], определим волновое поле в приближении Маслова. Опуская несложные, но громоздкие преобразования для величины волнового поля, в приближении Маслова можем написать

$$U_m(X, Z) = (ik/2\pi)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{A_0(\xi(p_x)) \exp\{ik\psi\}}{\{\psi_0'(\xi(p_x))\}^{1/2}} dp_x, \quad (4)$$

$$\psi = \psi_0(\xi(p_x)) - \xi(p_x)p_x + Xp_x + Z(1 - p_x^2)^{1/2},$$

где зависимость $\xi = \xi(p_x)$ определяется из условия $\frac{\partial \psi}{\partial \xi} = p_x$, а через ψ_0'' обозначена величина $\frac{\partial^2 \psi_0}{\partial p_x^2}$.

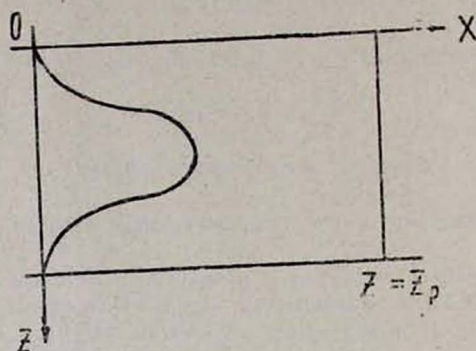


Рис. 1. Начальное распределение волнового поля в плоскости $z=0$.

С другой стороны, нетрудно получить строгое решение задачи (1), (3) [1].

$$U_0(X, Z) = \frac{k}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} A_0(\xi) \exp\{ik(\psi_0(\xi) - p_x(\xi - X) + Z\sqrt{1 - p_x^2})\} d\xi dp_x = \\ = \sqrt{k/2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} U_0(p_x) \exp\{ik(Xp_x + Z\sqrt{1 - p_x^2})\} dp_x, \quad (5)$$

где

$$U_0(p_x) = \sqrt{k/2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} A_0(\xi) \exp\{ik(\psi_0(\xi) - p_x \xi)\} d\xi. \quad (6)$$

Выясним, при каких условиях точное решение задачи (5) переходит в масловскую асимптотику (4). Как нетрудно убедиться, для этого перехода необходима возможность применения метода стационарной фазы к интегралу (6). Из условия стационарности фазы $\frac{\partial}{\partial \xi}(\psi_0(\xi) - p_x \xi) = 0$, получаем

$$p_{xst} = \frac{\partial \psi_0(\xi)}{\partial \xi}. \quad (7)$$

Применение метода стационарной фазы к интегралу (6) дает

$$U_0(p_x) = \sqrt{i} A_0(\xi(p_x)) \exp\{ik(\psi_0(\xi(p_x)) - p_x \xi(p_x))\} / \{\psi_0''(\xi(p_x))\}^{1/2}. \quad (8)$$

Подстановка (8) в (5) приводит к масловской асимптотике (4). Таким образом, условия применимости масловской асимптотики (4) определ-

яются условием применимости метода стационарной фазы к интегралу (6). Применение метода стационарной фазы к интегралу (6) требует, чтобы в окрестности стационарной точки $p_{xst} = \frac{\partial \psi_0(\xi)}{\partial \xi}$ амплитуда $A_0(\xi)$ изменялась достаточно медленно, т. е. чтобы имело место неравенство

$$a_f \left| \frac{\partial A_0}{\partial \xi} \right| \ll A_0, \quad (9)$$

где

$$a_f = \{2/k\psi_0''(\xi)\}^{1/2} \quad (10)$$

есть френелевский масштаб. Условия применимости метода (9), (10) фактически определяют ограничения на распределение амплитуды в начальной плоскости $Z=0$.

Проиллюстрируем полученные результаты на примере распространения сфокусированной гауссовой волны. Пусть в начальной плоскости $Z=0$ распределение поля имеет вид рис. 1

$$U_0(\xi) = \exp\{-\xi^2/W^2 - ik\xi^2/2F\}. \quad (11)$$

Здесь W — размер гауссового окна, F — фокусное расстояние. После подстановки (11) в (5) получим точное решение задачи в виде

$$U_\tau(X, Z) = \frac{k}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\xi^2/W^2 + ik\xi\psi) d\xi dp_x, \quad (12)$$

где $\psi = Xp_x + Z\sqrt{1-p_x^2} - \xi p_x - \xi^2/2F$.

Для нахождения масловской асимптотики необходимо вычислить интеграл

$$\tilde{U}_0(p_x) = \sqrt{k/2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\{-\xi^2/W^2 - ik(\xi^2/2F + p_x\xi)\} d\xi \quad (13)$$

методом стационарной фазы. Фазовая функция интеграла (13) имеет вид

$$\psi = -\xi^2/2F - \xi p_x. \quad (14)$$

Из условия стационарности фазы $\frac{\partial \psi}{\partial \xi} = 0$ находим

$$\xi_{st} = -Fp_x, \quad \left. \frac{\partial^2 \psi}{\partial \xi^2} \right|_{\xi=\xi_{st}} = -1/F. \quad (15)$$

Применение метода стационарной фазы к интегралу (13) приводит к выражению

$$\tilde{U}_m(p_x) = \sqrt{F/i} \exp(-F^2 p_x^2 / W^2 + ikF p_x^2). \quad (16)$$

После подстановки выражения (16) в (5) получим масловскую асимптотику задачи в виде

$$U_M(X, Z) = \sqrt{\frac{kF}{2\pi i}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\{-F^2 p_x^2 / W^2 + ik(Fp_x^2/2 + p_x X + Z\sqrt{1-p_x^2})\} dp_x \quad (17)$$

Переход от точного решения (12) к масловской асимптотике (17) возможен тогда, когда имеет место неравенство (9), т. е., если амплитудный множитель достаточно слабо меняется в окрестности стационарной точки. Условие (9) приводит к требованию

$$\mu_2 = \frac{2F}{kW^2} \ll 1. \quad (18)$$

Физически это означает, что для применимости метода Маслова достаточно, чтобы френелевский радиус $a_f = \sqrt{\lambda F}$ был меньше размера гауссова окна W .

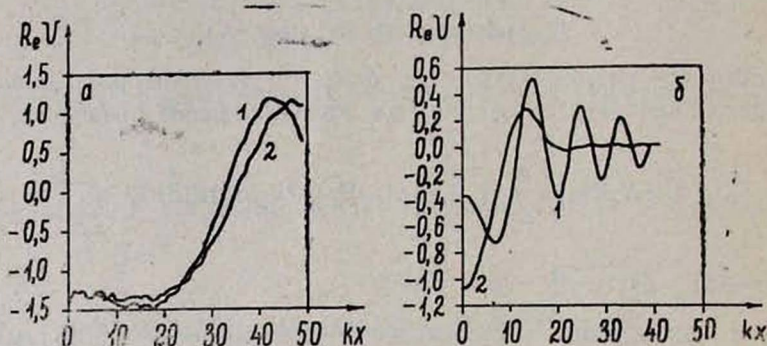


Рис. 2. Расчет величины волнового поля в плоскости $kz=280$: а) параметры задачи составляют $kW=60$, $kF=600$, график 1 соответствует строгому решению, график 2—масловскому приближению; б) параметры задачи составляют $kW=6$, $kF=60$, график 1 соответствует строгому решению, график 2—масловскому приближению.

На рис. 2а приведены графики зависимости величины волнового поля ($Re U$) точного решения (12) (график 1) и масловской асимптотики (16) (график 2) в плоскости $kz=280$ при следующих значениях параметров волны: $kF=600$, $kW=60$. При этих значениях малые параметры задачи $\mu_{1,2}$ соответственно составляют $\mu_1=1/60$, $\mu_2=1/3$. Как показывают данные расчеты, метод Маслова при данных значениях параметров задачи дает приемлемые результаты (имеет место требование (18)), в то время как при значениях $kF=60$, $kW=6$ приближение Маслова (график 2 рис. 2б) неприменимо. Параметры малости соответственно составляют $\mu_1=1/6$, $\mu_2=3$.

Установленный в работе критерий применимости (9) позволяет в расчетах вместо многократного интегрирования быстроосциллирующего интеграла (5) (что на практике требует большого машинного времени [9]) свести задачу к однократному интегралу (4).

Полученные результаты могут также оказаться полезными при рассмотрении задачи о пределах применимости метода Маслова при отсутствии точного решения, а также для различных интегральных-асимптотических методов, таких, как метод интерференционных интегралов Ю. И. Орлова [10], метод квазичастиц [11].

ЛИТЕРАТУРА

1. М. Б. Виноградова, О. В. Руденко, А. П. Сухоруков. Теория волн. М., Наука, 1980.
2. В. П. Маслов, М. В. Федорюк. Квазиклассическое приближение для уравнений квантовой механики. М., Наука, 1976.
3. Ю. А. Кравцов. Акуст. журн., 4. 1 (1968).
4. В. П. Маслов. Асимптотические методы и теория возмущений. М., Наука, 1988.
5. Д. С. Лукин, Е. А. Палкин. В сб. Теоретическое и экспериментальное исследование распространения декаметровых радиоволн. М., Наука, 1976, с. 149.
6. Д. С. Лукин, А. С. Мартынов, Ю. Г. Спиридонов. В сб. Проблемы радиофизики и электроники. Куйбышев, 1976, с. 5.
7. Д. С. Лукин, Ю. Г. Спиридонов. В сб. Лучевое приближение и вопросы распространения радиоволн. М., 1971, с. 45.
8. А. А. Асатрян, А. Ю. Гивенталь, Ю. А. Кравцов. 13-ая Всесоюзная школа операторов в функциональных пространствах. Тезисы докл., Куйбышев. 1988, с. 16.
9. Л. И. Турчак. Основы численных методов. М., Наука, 1987.
10. Ю. И. Орлов. Труды МЭИ, 119, 82 (1971).
11. N. Marcuvitz, Rad. Sci. 19, № 5, 1139 (1984).

LIMITS OF APPLICABILITY OF MASLOVS METHOD

A. A. ASATRYAN, YU. A. KRAVTSOV

The applicability of Maslovs method is considered and the sufficient conditions of applicability are found.

ՄԱՍԼՈՎԻ ՄԵԹՈԴԻ ԿԻՐԱՌՈՒԹՅԱՆ ՍԱՀՄԱՆՆԵՐԸ

Ա. Ա. ԱՍԱՏՐՅԱՆ, ՅՈՒ. Ա. ԿՐԱՎՏՈՎ

Քննարկվում են Մասլովի մեթոդի կիրառության սահմանները, և ձևակերպվում են մեթոդի կիրառության բավարար պայմանները: Ստացված արդյունքները կիրառվում են դառայան փնջի տարածման օրինակի վրա:

УДК 621.039.6

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ КАНАЛИРОВАНИЯ В ИОННЫХ КРИСТАЛЛАХ

Н. Н. КОРХМАЗЯН, Г. Г. МЕЛИКЯН

Армянский педагогический институт им. Х. Абовяна

(Поступила в редакцию 10 мая 1993 г.)

Разработан метод вычисления эффективных потенциалов каналирования релятивистских заряженных частиц в ионных кристаллах, учитывающий вклад всех ионов в формирование поля. Вычислены эффективные потенциалы плоскостного и осевого каналирования для объемноцентрированных и гранецентрированных кристаллов.

ВВЕДЕНИЕ

Исследование процесса каналирования релятивистских заряженных частиц в кристаллах имеет большое научное и практическое значение. В настоящее время каналирование частиц в кристаллах является одним из эффективных механизмов получения рентгеновского и γ -излучения [1]. Кроме того, в последние годы в ряде экспериментальных и теоретических работ (см. [2] и приведенную там литературу) была показана возможность использования излучения при каналировании для диагностики свойств кристаллов. Измерение излучения при каналировании релятивистских частиц в монокристаллах может стать новым инструментом для определения дефектов, примесей, кристаллических потенциалов и других характеристик простых и сложных структур.

Теория каналирования релятивистских заряженных частиц в кристаллах интенсивно развивалась после первой теоретической работы Кумахова [3], где для исследования проблемы предлагался метод усреднения по Линдхарду [4] модельных потенциалов для изолированных атомов. В настоящее время имеется ряд обзоров [5] и монографий [1, 6], посвященных этому явлению. Однако во всех этих работах процесс каналирования рассмотрен в основном в кристаллах с ковалентной связью. Используемые в этих работах быстроубывающие потенциалы электронейтральных атомов не применимы для вычисления эффективных потенциалов каналирования ионных кристаллов. Существенной особенностью ионных кристаллов является то, что в них существуют дальнедействующие силы, порожденные отдельными заряженными кристаллическими осями и плоскостями, и при формировании эффективного потенциала в любом канале необходимо учитывать вклад от всех ионов кристалла. Это обстоятельство существенно влияет на форму и величину эффективных потенциалов и достаточно усложняет их расчеты.

Целью настоящей работы является разработка метода вычисления эффективных потенциалов плоскостного и осевого каналирования частиц в ионных кристаллах. Для этого в рамках линеаризованного уравнения самосогласованного поля исследуется структура электростатических полей в ионных кристаллах, решается уравнение Пуассона для скалярного потенциала кристалла и полученное решение усредняется по фононному спектру кристалла. С целью нахождения эффективных потенциалов осевого и плоскостного каналирования проводится также усреднение полученного трехмерного потенциала по элементарной ячейке кристаллической оси и плоскости. Рассчитаны эффективные потенциалы плоскостного и осевого каналирования для объемноцентрированных (типа CsCl) и гранецентрированных (типа KCl) кристаллов.

1. Решение уравнения Пуассона для ионного кристалла типа CsCl

Для вычисления электростатического поля ионного кристалла типа CsCl воспользуемся приближением Иенсена-Майера-Гослера [7], суть которого состоит в том, что в решетке положительные и отрицательные ионы упакованы, как шары, соответственно с эффективными радиусами R_{0+} и R_{0-} . Набор шаров двух типов ионов образует две подобные подрешетки с кубической симметрией. Ионы Cl^- расположены в вершинах кубической решетки, в центре которой находится ион Cs^+ . Совершенно аналогично можно выделить ячейку, где каждый ион хлора окружен восемью ионами цезия. Совместив начало координат с центром иона Cs^+ , напомним уравнение Пуассона для потенциала положительной подрешетки

$$\Delta \varphi^+(\vec{r}) = -4\pi \sum_{\vec{l}_+} \rho_0^+(\vec{r} - \vec{l}_+), \quad (1.1)$$

где $\rho_0^+(\vec{r} - \vec{l}_+)$ — плотность заряда в точке $\vec{r}$ от иона с центром в узле $\vec{l}_+$ при температуре кристалла $T=0^\circ\text{C}$. Решение уравнения (1.1) можно представить в виде [8]

$$\varphi^+(\vec{r}) = -4\pi \int G_+(\vec{r} - \vec{r}') \rho_0^+(\vec{r}') d\vec{r}', \quad (1.2)$$

где функция Грина удовлетворяет уравнению

$$\Delta G_+(\vec{r} - \vec{r}') = \sum_{\vec{l}_+} \delta(\vec{r} - \vec{r}' - \vec{l}_+). \quad (1.3)$$

Решение этого уравнения имеет вид

$$G_+(\vec{r} - \vec{r}') = -\frac{1}{d^3} \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{1}{k^2} e^{i\vec{k}(\vec{r} - \vec{r}')}, \quad (1.4)$$

где $\vec{k}$ — вектор обратной решетки

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{d} (l\vec{x}_0 + n\vec{y}_0 + m\vec{z}_0), \quad (1.5)$$

d — постоянная решетки, а (l, n, m) — целые числа.

Подставляя (1.4) в (1.2), получаем

$$\varphi^+(\vec{r}) = \frac{4\pi}{d^3} \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{1}{k^2} e^{i\vec{k}\vec{r}} \int e^{-i\vec{k}\vec{r}'} \rho_0^+(\vec{r}') d\vec{r}'. \quad (1.6)$$

Если начало координат совместить с центром ближайшего иона хлора, например, в точке $\vec{a} = \frac{1}{2}(\vec{x}_0 + \vec{y}_0 + \vec{z}_0)$, где (x_0, y_0, z_0) — орты координатных осей, то потенциал отрицательной подрешетки получится из (1.6) с помощью замены $\rho_0^+ \rightarrow \rho_0^-$. Переход к исходной системе координат осуществляется заменой $\vec{r} \rightarrow \vec{r} - \vec{a}$, что дает

$$\varphi^-(\vec{r}) = \frac{4\pi}{d^3} \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{(-1)^{m+n+l}}{k^2} e^{i\vec{k}\vec{r}} \int e^{-i\vec{k}\vec{r}'} \rho_0^-(\vec{r}') d\vec{r}'. \quad (1.7)$$

Потенциал всего кристалла получается суммированием выражений (1.6) и (1.7).

2. Усреднение потенциала по фоновому спектру кристалла

Пусть центр положительного иона вследствие тепловых колебаний сместился в окрестность $d\vec{R}_T$ точки $\vec{R}_T$. Вероятность этого смещения обозначим через $P(\vec{R}_T)d\vec{R}_T$. Заметим, что плотность заряда в точке $\vec{r}'$ от смещенного иона равняется плотности заряда от того же иона в точке $\vec{R} = \vec{r}' - \vec{R}_T$ до ее смещения. Тогда, усредняя по тепловым колебаниям выражения (1.6) и (1.7), для потенциала кристалла получаем

$$\varphi_T(\vec{r}) = \frac{4\pi}{d^3} \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{1}{k^2} e^{i\vec{k}\vec{r}} \int e^{-i\vec{k}\vec{R}} [\rho_0^+(\vec{R}) + (-1)^{m+n+l} \rho_0^-(\vec{R})] d\vec{R} \int e^{-i\vec{k}\vec{R}_T} P(\vec{R}_T) d\vec{R}_T \quad (2.1)$$

Для относительно низких температур кристалла, когда амплитуды колебаний ионов малы по отношению к постоянной решетки d , можно в качестве функции распределения $P(\vec{R}_T)$ использовать гармоническое изотропное представление

$$P(\vec{R}_T) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2} u} \exp\left(-\frac{R_T^2}{2u^2}\right), \quad (2.2)$$

где u^2 — среднее значение квадрата амплитуды тепловых колебаний ионов обоих типов. Подставляя (2.2) в (2.1), для электростатического потенциала кристалла с учетом влияния фонового спектра окончательно получим

$$\varphi_T(\vec{r}) = \frac{4\pi}{d^3} \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{1}{k^2} e^{-\frac{k^2 u^2}{2} + i\vec{k}\vec{r}} [W^+ + (-1)^{m+n+l} W^-], \quad (2.3)$$

где

$$W_{\pm} = \int \rho_{\pm}^{\pm}(\vec{R}) e^{-i\vec{k}\vec{R}} d\vec{R}. \quad (2.4)$$

3. Усреднение потенциала по элементарной ячейке кристалла в режиме плоскостного каналирования

Пусть быстрая заряженная частица движется под малым углом по отношению к какой-либо главной кристаллической плоскости (x, y) и под большим углом по отношению к главным кристаллическим осям, находящимся в этой плоскости. Тогда потенциал взаимодействия частицы с кристаллом можно усреднить в плоскости (x, y). Ввиду периодичности функции (2.3) на этой плоскости, ее среднее значение находится по формуле

$$\overline{\varphi_T(z)} = \frac{1}{d^2} \int_0^d dx \int_0^d \varphi_T(x, y, z) dy. \quad (3.1)$$

Ниже, ввиду полной аналогии между подрешетками, вычисления проводятся только для положительной подрешетки.

Предположим, что частица движется в плоскости, параллельной плоскости (x, y), расположенной от нее на расстоянии $z (z \leq R_0)$. Тогда элементарная ячейка разделяется на две существенно различные области S_1 и S_2 (рис. 1). В области S_2 частица движется внутри иона, и поэтому в потенциале взаимодействия должен фигурировать структурный фактор иона W^+ . Если распределение заряда внутри иона имеет сферическую симметрию, то решение (2.3) существенно упрощается

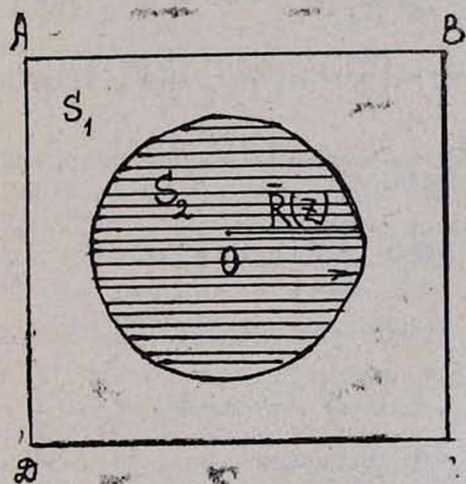


Рис. 1. В области S_1 частица движется вне структуры иона, S_2 —область пересечения частицы со структурой иона.

в области, не пересекающейся с ионом. Для таких областей ионы можно считать точечными и распределение заряда задавать в виде

$\rho_{\pm}^{\pm}(\vec{R}) = \pm e \delta(\vec{R})$, где $e = |e|$, после чего из (2.3) получим

$$\varphi_{\text{вн.ст.}}(\vec{r}) = \frac{4\pi e}{d^3} \sum_{k \neq 0} \frac{1}{k^3} e^{ikr - \frac{k^2 n^2}{2}} [1 - (-1)^{m+n+l}]. \quad (3.2)$$

С учетом сказанного формулу (3.1) удобно представить в виде

$$\overline{\varphi_T^+}(z) = \frac{1}{d^3} \left\{ \int_{S_2} [\varphi_T^+(\vec{r}) - \varphi_{\text{вн.ст.}}^+(\vec{r})] dx dy + \int_{S_1 \cup S_2} \varphi_{\text{вн.ст.}}^+(\vec{r}) dx dy \right\}. \quad (3.3)$$

Поскольку ионы обладают сферической симметрией, то область S_2 будет представлять из себя круг с радиусом $R(z) = \text{Re} \sqrt{R_{0+}^2 - z^2}$. Переходя теперь в первом интеграле формулы (3.3) к цилиндрическим координатам и производя интегрирование, получим

$$\begin{aligned} \overline{\varphi_T^+}(z) = & \frac{1}{\pi d^3} \sum_{\mu \neq 0} \frac{R^+(z)}{\mu^{2\nu}} J_1 \left(\frac{2\pi}{d} \nu R^+(z) \right) [W^+ - e] \exp \left(i \frac{2\pi}{d} m z - \mu^2 \lambda^2 \right) + \\ & + \frac{2e}{\pi d} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m^3} \cos \left(\frac{2\pi}{d} m z \right) \exp(-m^2 \lambda^2), \end{aligned} \quad (3.4)$$

где

$$\mu^2 = m^2 + n^2 + l^2, \quad \nu = \sqrt{n^2 + l^2}, \quad \lambda = \sqrt{2}u/d. \quad (3.5)$$

Потенциал $\overline{\varphi_T^-}(z)$ для той же плоскости получится из (3.4) заменой $e \rightarrow -e$, $W^+ \rightarrow W^-$, $z \rightarrow z - \frac{d}{2}$.

Окончательно для усредненного потенциала всего кристалла находим

$$\begin{aligned} \overline{\varphi_T(z)} = & \frac{1}{\pi d^3} \sum_{\mu \neq 0} \frac{1}{\mu^{2\nu}} \left\{ R^+(z) J_1 \left[\frac{2\pi}{d} \nu R^+(z) \right] (W - e) + \right. \\ & + (-1)^m R^-\left(z - \frac{d}{2}\right) J_1 \left[\frac{2\pi}{d} \nu R^-\left(z - \frac{d}{2}\right) \right] (W^+ + e) \exp \left(\frac{2\pi i}{d} m z - \mu^2 \lambda^2 \right) + \\ & \left. + \frac{4e}{\pi d} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{(2p-1)^3} \cos \left[\frac{2(2p-1)\pi z}{d} \right] \exp[-(2p-1)^2 \lambda^2] \right\}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

$$\text{Здесь } R^-(z) = \text{Re} \sqrt{R_{0-}^2 - \left(z - \frac{d}{2}\right)^2}.$$

Формулой (3.6) следует пользоваться лишь для области $0 \leq z \leq \frac{d}{2}$. Из

симметрии задачи следует, что плоскость $z = \frac{d}{2}$ является плоскостью симметрии для хода потенциала в канале $0 \leq z \leq d$. В остальных каналах ход потенциала периодически повторяется.

4. Эффективный потенциал плоскостного каналирования в ионных кристаллах типа KCl

Вычислим эффективный потенциал плоскостного каналирования для класса гранецентрированных ионных кристаллов типа KCl. Такой кристалл состоит из ионов двух типов, размещенных в чередующихся

точках простой кубической решетки таким образом, что ближайшими соседями каждого иона являются шесть ионов другого рода. В этих кристаллах основные кристаллические плоскости электронейтральны, в отличие от кристаллов типа $CsCl$. Однако, здесь возможно каналирование вдоль заряженных наклонных плоскостей. Для вычисления эффективных потенциалов каналирования этих плоскостей сначала рассмотрим подрешетку положительных ионов. Эту подрешетку в свою очередь можно разбить на четыре кубические подрешетки. Если начало координат совместить с одной из вершин первой подрешетки, то вторая будет смещена на величину $\frac{d}{2}$ относительно первой вдоль осей x и y , 3-я подрешетка — вдоль осей z , y , а 4-я вдоль осей z , x . Потенциал простой кубической решетки, как было показано выше, определяется первой слагаемой формулы (2.3). Для того, чтобы найти потенциал второй подрешетки относительно выбранной системы координат, в этом выражении необходимо сделать замену $x \rightarrow x - \frac{d}{2}$, $y \rightarrow y - \frac{d}{2}$, $z \rightarrow z - \frac{d}{2}$. Учитывая, что в этом случае $e^{i\vec{k}\vec{r}} \rightarrow (-1)^{n+l} e^{i\vec{k}\vec{r}}$ для потенциала второй подрешетки в той же точке получаем

$$\varphi_{11}^+ = \frac{4\pi}{d} \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{(-1)^{n+l}}{k^2} e^{i\vec{k}\vec{r} - \frac{k^2 d^2}{2}} W^+. \quad (4.1)$$

Аналогично определяются потенциалы остальных подрешеток. Согласно принципу суперпозиции полей для потенциала положительной подрешетки кристалла получаем

$$\varphi_T^+(\vec{r}) = \frac{4\pi}{d^3} \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{1}{k^2} e^{i\vec{k}\vec{r} - \frac{k^2 d^2}{2}} [1 + (-1)^{n+l} + (-1)^{n+m} + (-1)^{m+l}] W^+. \quad (4.2)$$

Для того, чтобы найти усредненный потенциал каналирования вдоль положительно заряженной плоскости, необходимо новую систему координат (x', y', z') выбрать так, чтобы ось z' была перпендикулярна этой плоскости, и усреднить выражение (4.2) вдоль плоскости (x', y') . Переход к новой системе координат можно осуществить с помощью двух поворотов старой координатной системы: вращением системы вокруг оси z на угол $\varphi = \frac{\pi}{4}$ с последующим вращением полученной системы

вокруг оси x' на угол $\alpha (\tan \alpha = \sqrt{2})$ таким образом, чтобы ось x' лежала на положительно заряженной плоскости (рис. 2). Учитывая некоторые простые геометрические соотношения в элементарной ячейке кристалла KCl (рис. 2), после несложных преобразований получаем

$$e^{i\vec{k}\vec{r}} = e^{i\vec{k}_0\vec{r}'}, \quad \vec{r}' = (x', y', z')$$

$$\vec{k}_0 = \left\{ \frac{\pi\sqrt{2}}{d} (n+l), \frac{2\pi}{d\sqrt{6}} (2m+n-l), \frac{2\pi}{d\sqrt{3}} (m-n+l) \right\}. \quad (4.3)$$

Таким образом, в новой системе координат, связанной с заряженной плоскостью кристалла, потенциал положительной подрешетки будет иметь вид

$$\varphi_{+}(\vec{r}') = \frac{4\pi}{d^3} \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{1}{k^3} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}'} - \frac{\hbar^2 u^2}{2} [1 + (-1)^{n+l} + (-1)^{m+l} + (-1)^{m+n}] W_{+}. \quad (4.4)$$

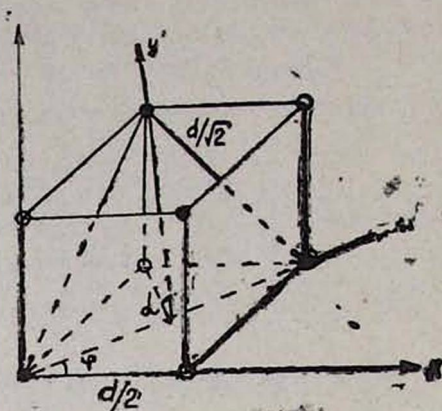


Рис. 2. Элементарная ячейка кристалла KCl, ●—K⁺, ○—Cl⁻.

Элементарная плоская ячейка имеет стороны $\frac{d}{\sqrt{2}}$ и $\frac{d\sqrt{6}}{4}$ соответственно вдоль осей x' и y' . Расстояние между ближайшими положительно заряженными плоскостями равно $\frac{d}{\sqrt{3}}$, между положительно и отрицательно заряженными плоскостями — $\frac{d}{2\sqrt{3}}$.

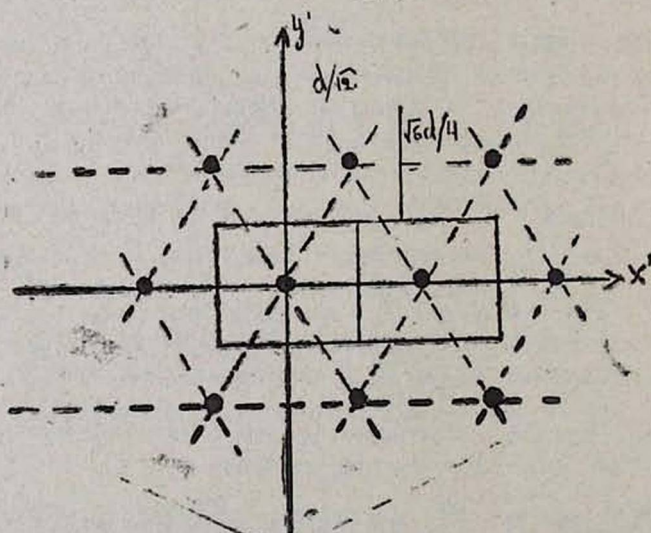


Рис. 3. Распределение положительных ионов в плоскости (x', y') .

Усредним потенциал $\varphi_T^+(r)$ по элементарной ячейке (рис. 3):

$$\overline{\varphi_T^+(z')} = \frac{4}{\sqrt{3}d^3} \left[\int_{\bigcirc} \varphi_T^+ dS + \int_{\square} \varphi_{\text{вн.ст.}}^+ dS - \int_{\bigcirc} \varphi_{\text{вн.ст.}}^+ dS \right]. \quad (4.5)$$

После несложных вычислений получим

$$\begin{aligned} \overline{\varphi_T^+(z')} = \frac{8}{\sqrt{2}\pi d} \sum_{m,n,l} \frac{e^{-2\pi^2 \mu^2 \xi^2}}{\mu^2} [1 + (-1)^{n+l} + (-1)^{m+n} + (-1)^{m+l}] e^{\frac{2\pi i}{3^{1/2}d} (m-n+l)z'} \times \\ \times \left\{ \frac{R^+(z')}{\sigma d} J_1 \left(\frac{\pi \sqrt{6} R^+(z') \sigma}{3d} \right) (W^+ - e) + \right. \\ \left. + \frac{\sqrt{2} \sin \left[\frac{\pi}{2} (l+n) \right] \sin \left[\frac{\pi}{4} (2m+n-l) \right]}{\pi^2 (l+n)(2m+n-l)} \right\}, \quad (4.6) \end{aligned}$$

где $\sigma = [3(n+l)^2 + (2m+n-l)^2]^{1/2}$, $\xi = \frac{u}{d}$.

Аналогично вычисляется потенциал отрицательной подрешетки в системе координат, связанной с отрицательным ионом. Для этого необходимо в (4.6) сделать замену

$$(W^+ - e) \rightarrow (W^- + e), \quad R^+ \rightarrow R^-, \quad (4.7)$$

$$\text{где } R^-(z') = \text{Re} \sqrt{R_{0-}^2 - \left(z' - \frac{d}{2}\right)^2}.$$

Для того, чтобы получить этот потенциал в исходной системе координат, связанной с положительно заряженным ионом, надо учитывать, что отрицательно заряженная плоскость смещена относительно положительной на отрезок $\frac{d}{2\sqrt{3}}$ вдоль оси z' . Поэтому при вычислении $\overline{\varphi_T^-(z')}$,

кроме (4.7), необходима замена $z' \rightarrow z' - \frac{d}{2\sqrt{3}}$. После этого для эффективного потенциала плоскостного каналирования частицы в ионном кристалле типа KCl окончательно получаем выражение:

$$\begin{aligned} \overline{\varphi_T^-(z')} = \frac{8}{\pi \sqrt{2}d} \sum_{m,n,l=0}^{\infty} \frac{1}{\mu^2} [1 + (-1)^{m+l} + (-1)^{m+n} + (-1)^{m+l}] e^{-\frac{2\pi i}{d\sqrt{3}} (m+l-n)z'} \times \\ \times \left\{ \frac{R^+(z')}{\sigma d} J_1 \left(\frac{\pi \sqrt{6} R^+(z')}{3\sigma d} \right) (W^+ - e) + \right. \\ \left. + \frac{\sqrt{2} \sin \left[\frac{\pi}{2} (l-n) \right] \sin \left[\frac{\pi}{4} (2m+n-l) \right]}{\pi^2 (l+n)(2m+n-l)} (1 + e^{-\frac{i\pi}{3} (m-n+l)}) + \right. \\ \left. + \frac{R^-(z')}{\sigma d} J_1 \left(\frac{\pi \sqrt{6} R^-(z')}{3\sigma d} \right) (W^- + e) e^{-\frac{i\pi}{3} (m-n+l)} \right\} e^{-2\pi^2 \xi^2 \mu^2}. \quad (4.8) \end{aligned}$$

Как и в предыдущем случае, формулой (4.8) следует пользоваться для первой половины канала $0 \leq z' \leq \frac{d}{2\sqrt{3}}$. Для построения потенциала во второй половине канала необходимо пользоваться симметрией потенциала по отношению к плоскости $z' = \frac{d}{2\sqrt{3}}$.

5. Эффективный потенциал осевого каналирования в ионном кристалле типа CsCl

Вычислим потенциал эффективного взаимодействия частицы с кристаллом в режиме осевого каналирования в ионном кристалле типа CsCl. Пусть быстрая заряженная частица пересекает плоскость (x, y) , перпендикулярную к направлению оси $[100]$, вдоль которой направлена ось z . Для нахождения эффективного потенциала осевого каналирования необходимо усреднить выражение (2.3) по направлению оси z . Поскольку потенциал (2.3) периодичен по x, y, z , то усреднение вдоль любой координаты сводится к усреднению на одном периоде, т. е. на отрезке d этой оси. При этом, если частица пересекает ион Cs⁺ на расстоянии $\sqrt{x^2 + y^2}$, то участок d разделяется на три части (рис. 4). В первой и третьей частях частица движется вне иона, а во второй части—внутри иона. Причем путь, который проходит частица внутри иона, имеет длину

$$R^+(x, y) = 2\text{Re} \sqrt{R_{0+}^2 - (x^2 + y^2)}. \quad (5.1)$$

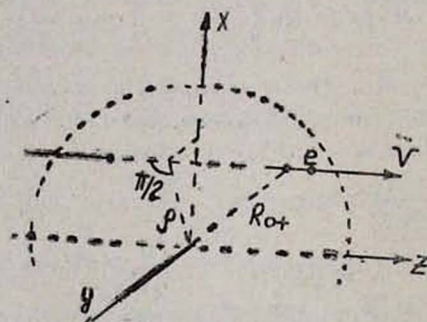


Рис. 4. Если частица пересекает ион, то участок d разделяется на три части. В первой и третьей части частица движется вне иона, а во второй части—внутри иона.

Аналогично, если частица пересекает отрицательный ион, то соответствующая длина будет

$$R^-(x, y) = 2\text{Re} \sqrt{R_{0-}^2 - \left(x - \frac{d}{2}\right)^2 - \left(y - \frac{d}{2}\right)^2}. \quad (5.2)$$

Усредним сначала потенциал положительной подрешетки

$$\overline{\varphi_T^{\pm}(x,y)} = \frac{1}{d} \left\{ \int_{-d/2}^{R^+/2} \varphi_{\text{вн.ст.}}^+(\vec{r}) dz + \int_{-R^+/2}^{R^+/2} \varphi_T^{\pm}(\vec{r}) dz + \int_{R^+/2}^{d/2} \varphi_{\text{вн.ст.}}^+(\vec{r}) dz \right\}. \quad (5.3)$$

Используя (2.3) и (3.2) для (5.3), после несложных вычислений получаем

$$\begin{aligned} \varphi_T^{\pm}(x,y) = & \frac{8}{\pi^2 d} \sum_{m,n,l=0}^{\infty} a_m a_n a_l \frac{e^{-\lambda^2 \mu^2}}{\mu^2 m} \cos\left(\frac{2\pi}{d} l x\right) \cos\left(\frac{2\pi}{d} n y\right) \times \\ & \times \sin\left(\frac{\pi}{d} m R^+(x,y) (W^+ - e) + \right. \\ & \left. + \sum_{n,l=0}^{\infty} \frac{a_n a_l}{\nu^2} e^{-\lambda^2 \nu^2} \cos\left(\frac{2\pi}{d} l x\right) \cos\left(\frac{2\pi}{d} n y\right), \right. \end{aligned} \quad (5.4)$$

где $a_{j \neq 0} = 1$, $a_{j=0} = \frac{1}{2}$, $j = m, n, l$.

Потенциал отрицательной подрешетки получим из (5.4) заменой $x \rightarrow x - d/2$, $y \rightarrow y - d/2$, $W^+ \rightarrow W^-$, $e \rightarrow -e$.

Таким образом, эффективный потенциал взаимодействия частицы с кристаллом в режиме осевого каналирования будет

$$\begin{aligned} \overline{\varphi_T(x,y)} = & \frac{8}{\pi^2 d} \sum_{m,n,l=0}^{\infty} \frac{a_m a_n a_l}{\mu^2 m} \cos\left(\frac{2\pi}{d} l x\right) \cos\left(\frac{2\pi}{d} n y\right) e^{-\lambda^2 \mu^2} \times \\ & \times \left[\sin\left(\frac{R^+}{d} \pi m\right) (W^+ - e) + (-1)^{l+n} \sin\left(\frac{R^-}{d} \pi m\right) (W^- + e) \right] + \\ & + \frac{4e}{\pi d} \sum_{n,l=0}^{\infty} \frac{a_l a_n}{\nu^2} e^{-\lambda^2 \nu^2} [1 - (-1)^{l+n}] \cos\left(\frac{2\pi}{d} l x\right) \cos\left(\frac{2\pi}{d} n y\right). \end{aligned} \quad (5.5)$$

6. Структурный фактор иона

Для дальнейшего исследования полученных выражений эффективных потенциалов (3.6), (4.6), (4.8) и (5.5) необходимо сначала вычислить конкретный вид формфакторов $W^{\pm}$. Для этого целесообразно представить распределение заряда внутри иона в виде

$$\rho_0^{\pm}(\vec{R}) = (Z \delta(\vec{R}) - V^{\pm}(\vec{R})) e, \quad (6.1)$$

где $V^{\pm}(\vec{R})$ — функция распределения плотности электронов внутри ионов кристалла, а $Z^{\pm}$ — число протонов в точечном ядре. Подставляя (6.1) в (2.4) и проводя интегрирование, находим

$$W^{\pm} = e(Z^{\pm} - \chi^{\pm}), \quad (6.2)$$

$$\chi^{\pm} = \frac{4\pi}{k} \int_0^{\infty} V^{\pm}(R) R \sin(kR) dR.$$



Возможное упрощение формулы (6.2) связано с выбором функции $V_{\pm}(R)$. Существуют два предельных случая, когда распределение электронов в ионе можно задавать аналитически.

Случай тяжелых ионов. Для таких ионов хорошим приближением является модель Томаса-Ферми-Дирака. В рамках этой модели распределение электронов в ионе можно задавать формулой Ленца-Менсена [7]

$$V(R) = \frac{N}{A} \frac{e^{-x}}{x^3} (1 + cx)^3, \quad (6.3)$$

$$A = \frac{8\pi a_0^2}{\xi^2 Z} P(c), \quad x = \left(\frac{R\xi}{a_0} \right)^{1/2} Z^{1/2}, \quad (6.4)$$

где N —число электронов в ионе данного сорта, a_0 —радиус Бора, а $P(c)$ —полином вида

$$P(c) = 2 + 18c + 72c^2 + 120c^3. \quad (6.5)$$

В формулах (6.3) и (6.4) c и ξ —вариационные параметры, которые определяются из условия минимизации энергии электронной системы. Численные значения этих параметров для разных ионов приведены в [7].

С учетом (6.3) и (6.4) для интеграла (6.2) получим

$$\chi = -\frac{4dN}{A\mu} \left(\frac{a_0}{\xi Z^{1/2}} \right)^2 \operatorname{Im} \{ e^{-i(2\gamma)^{-2}} [x D_{-1}(x) + 3cx^2 D_{-2}(x) + \\ + 6c^2 x^3 D_{-3}(x) + 6c^3 x^4 D_{-4}(x)] \}, \quad x = (-2bi)^{-1/2}, \quad (6.6)$$

где $D_n(x)$ обозначает функцию параболического цилиндра. Выбирая соответствующие константы, с помощью выражения (6.6) можно вычислить численные значения эффективных потенциалов плоскостного и осевого каналирования в тяжелых ионных кристаллах разных структур. На рис. 5 и 6 приведены соответствующие расчеты для

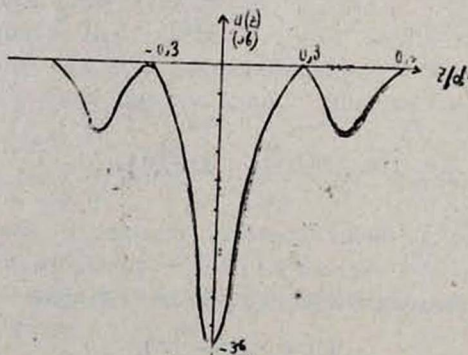


Рис. 5. Эффективный потенциал плоскостного каналирования электронов внутри кристалла $CsCl$.

кристалла $CsCl$ при плоскостном каналировании электронов и позитронов.

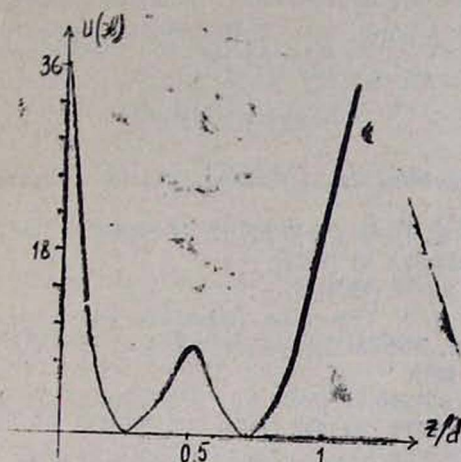


Рис. 6. Эффективный потенциал плоскостного каналирования позитронов внутри кристалла $CsCl$.

Ионный кристалл LiH . Другим наиболее простым случаем, когда удастся аналитически вычислить формфакторы $W^\pm$, является ионный кристалл LiH . В этом кристалле ионы Li^+ и H^- представляют из себя водородоподобные атомы, плотность распределения электронов в которых задается в виде [9]

$$V^\pm(R) = \frac{2(Z_1^\pm)^3}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2Z_1^\pm}{a_0} R}, \quad Z_1 = Z - \frac{5}{16}. \quad (6.7)$$

Подставляя это выражение в (6.2) и проводя интегрирование, получаем

$$W^\pm = eZ^\pm - \frac{8\pi\omega^\pm a^\pm}{(a_\pm^2 + k^2)^2}, \quad (6.8)$$

$$\omega = \frac{2e(Z_1^\pm)^3}{\pi a_0^3}, \quad a^\pm = \frac{2Z_1^\pm}{a_0}.$$

Заключение

Таким образом, в статье разработан метод вычисления электростатического потенциала в ионных кристаллах, учитывающий вклад всех ионов в формирование поля в кристалле. С помощью усреднения по тепловым колебаниям и по элементарной ячейке кристалла получены общие выражения для эффективных потенциалов плоскостного и осевого каналирования объемноцентрированных и гранецентрированных ионных кристаллов. Для сравнительно тяжелых и легких ион-

ных кристаллов вычислены входящие в общие выражения структурные факторы ионов. Для кристалла $CsCl$ проведены численные расчеты и приведены соответствующие графики эффективных потенциалов в плоскостном канале для электронов и позитронов.

ЛИТЕРАТУРА

1. М. А. Кумахов. Излучение каналированных частиц в кристаллах. М., Энергоатомиздат, 1986.
2. В. М. Искандарян и др. Письма в ЖТФ, 17, 83 (1991).
3. М. А. Кумахов. ЖЭТФ, 72, 83 (1977).
4. И. Линдхард. УФН, 95, 14 (1969).
5. И. П. Калашиников, М. М. Стриханов. Квантовая электроника, 8, 2293 (1981).
6. В. А. Базылев, Н. К. Жеваго. Излучение быстрых частиц в веществе во внешних полях. М., Наука, 1987.
7. П. Гамбош. Статистическая теория атома и ее применения. М., ИЛ, 1951.
8. А. С. Геворкян и др. ЖТФ, 59, 297 (1989).
9. Г. Бете, Э. Солпитер. Квантовая механика с одним и двумя электронами. М., Физматгиз, 1960.

THE THEORETICAL INVESTIGATION OF EFFECTIVE POTENTIALS OF CHANNELING IN IONIC CRYSTALS

N. N. CORKHMAZIAN, G. G. MELIKIAN

The theory of channeling for relativistic particles in ionic crystals is developed. The effective potentials of plane and axial channeling in volume-centered and side-centered crystals are obtained.

ԻՈՆԱՅԻՆ ԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐՈՒՄ ԽՈՒՂԱԿԱՎՈՐՄԱՆ ԷՖԵԿՏԻՎ ՊՈՏԵՆՑԻԱԼՆԵՐԻ ՏԵՍԱԿԱՆ ՀԵՏԱԶՈՏՈՒՄԸ

Ն. Ն. ՂՈՐԽՄԱԶՅԱՆ, Գ. Գ. ՄԵԼԻԿՅԱՆ

Մշակված է իոնային բյուրեղներում լիցքավորված ռելյատիվիստիկ մասնիկների խողակավորման էֆեկտիվ պոտենցիալների տեսությունը: Ծավալակենտրոն և նիստակենտրոն իոնային բյուրեղների համար ստացված են էլեկտրոնային և պոզիտրոնային փնջերի հարթ և առանցքային խողակավորման էֆեկտիվ պոտենցիալները:

КВАНТОВЫЕ ЭФФЕКТЫ КОЛЛАПСА И ВОЗРОЖДЕНИЯ ОСЦИЛЛЯЦИИ НАСЕЛЕННОСТИ В РЕЗОНАНСНОМ СЖАТОМ СВЕТЕ

А. Д. ГАЗАЗЯН, М. Л. ТЕР-МИКАЕЛЯН, Б. Г. ШЕРМАН

Институт физических исследований НАН Армении

(Поступила в редакцию 30 июля 1993 г.)

Рассматривается динамика взаимодействия двухуровневого атома с когерентным сжатым светом. Исследуется явление коллапса и возрождения осцилляций населенности в зависимости от параметров поля. Найдены периоды возрождений и постоянные распадов. Показано, что эти величины зависят от фаз и степени сжатия квантового поля. Результаты получены как для случая однофотонного, так и для двухфотонного резонансов.

1. Введение

Создание высококогерентных источников света открыло широкие возможности для проведения новых экспериментов с целью обнаружения тонких эффектов оптической квантовой когерентности при взаимодействии с атомами. Квантовые когерентные состояния электромагнитного поля описываются в представлении, где диагонален оператор уничтожения фотона. При этом квантовая корреляционная функция, определенная по Глауберу, полностью факторизуется, что соответствует случаю полностью когерентного излучения [1, 2].

Исследование квантовых эффектов когерентности света при взаимодействии с атомами впервые рассмотрено в работах [3—5]. Последние достижения в экспериментальной технике позволяют провести эксперименты по взаимодействию одного атома с отдельной модой излучения [6, 7]. В работах [8, 9] на основе численных и аналитических расчетов впервые предсказаны явления «коллапса» и «возрождения» в поведении населенности атома. В случае классического поля такие явления отсутствуют, что указывает на их квантовый характер, обусловленный дискретностью фотонов. Эти явления наблюдались в экспериментах [6, 7] и в дальнейшем изучались многими авторами.

В последнее время интенсивно проводятся теоретические и экспериментальные исследования новых квантовых состояний света, которые называются «сжатыми» или «двухфотонными» когерентными состояниями [10, 11]. Развитие исследований сжатого света стимулировало также интенсивное изучение взаимодействия атомов с излучением в сжатом состоянии. В работе [12] в случае небольшого параметра сжатия проведены численные расчеты распадов и возрож-

дений в сжатом поле. Влияние особого «осциллирующего» распределения фотонов сильного сжатого света на распады и возрождения в инверсии населенности атома изучалось в работе [13].

В данной работе мы изучаем динамику взаимодействия двухуровневого атома с когерентным и сжатым светом. Исследовано явление «коллапса» и «возрождения» осцилляций населенности в зависимости от параметров когерентного и сжатого света. Результаты получены как в случае однофотонного, так и в случае двухфотонного резонансов.

2. Случай однофотонного резонанса

Рассмотрим двухуровневый атом в квантованном внешнем поле. Нас интересует поведение системы в зависимости от времени, когда в начальный момент поле задается в некотором квантовом состоянии, а атом находится в возбужденном состоянии. Такая ситуация реализуется в эксперименте, когда разряженный атомный пучок проходит через резонатор с высокой добротностью и атомы возбуждаются перед входом в резонатор [6, 7]. Если в начальный момент поле содержит n фотонов, то для системы характерны осцилляции с частотой Раби

$$\Omega(n) = \sqrt{\epsilon^2 + 4n|\beta|^2}, \quad (1)$$

где $\epsilon = \omega_0 - \omega$ есть расстройка частоты, а β — матричный элемент однофотонного перехода. Если же поле есть пакет по состояниям числа фотонов, то осцилляции нужно усреднить по соответствующему распределению.

Если атом в начальный момент времени находился в возбужденном состоянии, то вероятность нахождения на верхнем уровне в момент t имеет вид:

$$P(t) = 1 - \sum_{n=0}^{\infty} f(n) \frac{4|\beta|^2(n+1)}{\Omega^2(n+1)} \sin^2 \frac{\Omega(n+1)}{2} t. \quad (2)$$

Распределение числа фотонов в начальный момент времени $f(n)$ различно для различных состояний. Если поле находилось в когерентном состоянии, то $f(n)$ есть распределение Пуассона. Распределение Пуассона имеет резкий максимум при $\bar{n} \gg 1$, поэтому при больших $\bar{n}$ можно воспользоваться разложением

$$\Omega(n+1) \approx \Omega(\bar{n}) + \gamma_1(\bar{n})(n - \bar{n}), \quad (3)$$

где

$$\gamma_1(\bar{n}) = \frac{2|\beta|^2}{\Omega(\bar{n})}. \quad (4)$$

Производя суммирование в (2) с использованием (3), получим приближенное выражение для вероятности в случае когерентного поля

$$P(t) \approx 1 - \frac{2|\beta|^2 \bar{n}}{\Omega^2(\bar{n})} \{1 - e^{\bar{n}[\cos \gamma_1(\bar{n})t - 1]} \cos[\Omega(\bar{n})t - \bar{n}\gamma_1(\bar{n})t + \bar{n} \sin \gamma_1(\bar{n})t]\}. \quad (5)$$

Из выражения для $P(t)$ (5) следует, что модуляция колебаний косинуса приводит к явлению распадов и возрождений осцилляций населенности. Период возрождений определяется выражением

$$T_R = \frac{2\pi}{\gamma_1(\bar{n})} = \pi \frac{\Omega(\bar{n})}{|\beta|^2} \quad (6)$$

Из (6) вытекает, что при увеличении среднего числа фотонов $\bar{n}$ период возрождений увеличивается, и возрождения отстоят дальше друг от друга. Это поведение резко отличается от случая, когда поле находится в состоянии числа фотонов и осцилляции населенности имеют постоянную амплитуду и частоту $\Omega(n)$.

Когда t мало отличается от kT_R (где k — целое число), $t = kT_R + \tau$ и $\gamma_1(\bar{n})\tau \ll 1$, то выражение (5) принимает вид:

$$P(\tau) \approx 1 - \frac{2|\beta|^2 \bar{n}}{\Omega^2(\bar{n})} \{1 - e^{-\bar{n}\gamma_1^2(\bar{n})\frac{\tau^2}{2}} \cos[\Omega(\bar{n})\tau - 2\pi k\bar{n}]\} \quad (7)$$

Затухание осцилляций по гауссовскому закону было предсказано Каммингсом [3] для случая точного резонанса. Распад осцилляций населенности имеет простой физический смысл. Вероятность $P(t)$ представляется суммой (2), члены которой представляют собой осцилляции Раби с излучением и поглощением фотонов. В момент $t=0$ система приготовлена в определенном состоянии и поэтому все эти процессы скоррелированы. Но поскольку все члены суммы имеют различные частоты $\Omega(n)$, они становятся раскоррелированными в течение некоторого времени t_c [14]:

$$t_c \sim \pi \frac{\Omega(\bar{n})}{\sqrt{\bar{n}} |\beta|^2}$$

Таким образом, возрождения являются следствием дискретности членов суммы, которая вызвана дискретностью фотонов. Это чисто квантовый эффект, не имеющий классического аналога. Полученный результат согласуется с результатами работ [8, 9]. В этих работах использован метод перевала для вычисления суммы (2) и проведено сравнение с численными расчетами. Как видно из полученных результатов, изложенный метод дает верное представление о поведении системы и будет использоваться для случая сжатых состояний света.

Распределение числа фотонов в сжатом состоянии света имеет вид [11]

$$f^{z,a}(n) = |\langle n|z,a\rangle|^2$$

$$\langle n|z,a\rangle = (n!)^{-1/2} (\nu/2\mu)^{n/2} \exp\left(-\frac{|a|^2}{2} + \frac{\nu^*}{2\mu} a^2\right) H_n(a/(2\mu\nu)^{1/2}), \quad (8)$$

где

$$\mu = \text{chr}, \quad \nu = -\text{sh}r e^{i\theta}, \quad \alpha = |z| e^{i\varphi}, \quad z = r e^{i\theta}, \quad (9)$$

H_n — полиномы Эрмита. Распределение (8) при выполнении условия

$$|\alpha|^2 \gg e^{4r} \quad (10)$$

имеет резкий максимум при значении среднего числа фотонов в сжатом состоянии

$$\bar{n}_s = |\alpha|^2 [\text{ch}2r + \text{sh}2r \cos(\Theta - 2\varphi)] + \text{sh}^2 r. \quad (11)$$

Условие (10) означает небольшое сжатие резонансного внешнего поля. Наличие резкого максимума при $n = \bar{n}_s$ позволяет провести приближенное вычисление суммы (2) при помощи разложения (3).

Вероятность иметь атом в возбужденном состоянии в момент времени t при взаимодействии со сжатым светом имеет следующий вид:

$$P_{r,s}(t) \approx 1 - \frac{2|\beta|^2 \bar{n}_s}{\Omega^2(\bar{n}_s)} \left\{ 1 - |\lambda(t)|^{-1/2} \exp \left[\frac{|\alpha|^2}{|\lambda(t)|^2} \Phi(t) \right] \times \right. \\ \left. \times \cos \left[\frac{|\alpha|^2}{|\lambda(t)|^2} \chi(t) + \Omega(\bar{n}_s)t - \bar{n}_s \gamma_1(\bar{n}_s)t - \frac{1}{2} \arg \lambda(t) \right] \right\}, \quad (12)$$

где $\Phi(t)$, $\chi(t)$ и $\lambda(t)$ определяются следующими выражениями:

$$\Phi(t) = \cos \gamma_1(\bar{n}_s)t - 1 - \sin^2 \gamma_1(\bar{n}_s)t [\cos(\Theta - 2\varphi) \text{ch}2r + \text{sh}2r |\text{sh}2r|, \\ \chi(t) = \sin \gamma_1(\bar{n}_s)t [\text{ch}2r + \cos(\Theta - 2\varphi) \text{sh}2r \cos \gamma_1(\bar{n}_s)t], \\ \lambda(t) = \text{ch}^2 r - \text{sh}^2 r \exp[2i\gamma_1(\bar{n}_s)t]. \quad (13)$$

Когда параметр сжатия r обращается в нуль, мы переходим к выражению (5) для когерентного света. Из выражений (12) и (13) следует, что вероятность в случае сжатого поля обладает периодичностью и испытывает распады и возрождения. Период возрождений есть

$$T_{RS} = \pi \frac{\Omega(\bar{n}_s)}{|\beta|^2}. \quad (14)$$

При малых отклонениях от периода $t = kT_{RS} + \tau$, $\gamma_1(\bar{n}_s)\tau \ll 1$, (k — целые числа) получаем простое выражение для вероятности

$$P_{r,s}(\tau) \approx 1 - \frac{2|\beta|^2 \bar{n}_s}{\Omega^2(\bar{n}_s)} \left[1 - e^{-\frac{\Gamma\tau}{2}} \cos(\Omega(\bar{n}_s)\tau - 2\pi k \bar{n}_s) \right], \quad (15)$$

где

$$\Gamma = |\alpha|^2 \gamma_1^2(\bar{n}_s) [\text{ch}4r + \text{sh}4r \cos(\Theta - 2\varphi)]. \quad (16)$$

Из полученных выражений видно, что поведение вероятности существенно зависит от параметра сжатия r и от разности фаз Θ и φ .

Таким образом, влияние сжатости поля проявляется в существенной зависимости скорости распада от фазы поля и параметра сжатия. Управляя фазой поля можно изменять поведение распадов и возрождений. С другой стороны, с помощью экспериментального определения скорости распада, можно определить степень сжатия поля. Как сле-

дует из формул (12) и (14) в случае однофотонной расстройки, с увеличением расстройки уменьшается амплитуда возрождений, скорость распадов и увеличиваются временные интервалы между ними.

3. Случай двухфотонного резонанса

При взаимодействии излучения с атомами в случае двухфотонного резонанса необходимо учитывать однофотонные штарковские сдвиги уровней. Случай двухфотонного резонанса при взаимодействии атома с полем в сжатом состоянии интересен тем, что сжатые состояния являются двухфотонными когерентными состояниями.

Рассмотрим двухуровневый атом, находящийся в двухфотонном резонансе с полем либо в когерентном, либо в сжатом состоянии.

Если атом в начальный момент времени находился в возбужденном состоянии, то вероятность в момент t задается выражением:

$$P(t) = 1 - \sum_{n=0}^{\infty} f(n) \frac{4|V_{12}(n)|^2}{\hbar^2 \Omega^2(n+2)} \sin^2 \frac{\Omega(n+2)}{2} t. \quad (17)$$

Частота Раби в случае двухфотонного резонанса определяется выражением

$$\Omega(n+2) = \frac{1}{\hbar} \{ [\hbar\varepsilon + W_2(n) - W_1(n)]^2 + 4|V_{12}(n)|^2 \}^{1/2}, \quad (18)$$

где ε — двухфотонная расстройка, $W_1(n)$ и $W_2(n)$ — штарковские сдвиги соответственно нижнего и верхнего уровней:

$$W_1(n) = \hbar^2(n+2) \sum_k \frac{|\beta_{1k}|^2}{\varepsilon_1 - \varepsilon_k + \hbar\omega}, \quad W_2(n) = \hbar^2(n+1) \sum_k \frac{|\beta_{2k}|^2}{\varepsilon_2 - \varepsilon_k - \hbar\omega}, \quad (19)$$

а $V_{12}(n)$ — матричный элемент двухфотонного перехода:

$$V_{12}(n) = \hbar^2 \sqrt{(n+1)(n+2)} \sum_k \frac{\beta_{1k}\beta_{2k}}{\varepsilon_1 - \varepsilon_k + \hbar\omega}. \quad (20)$$

Когда поле в когерентном состоянии, то $f(n)$ есть распределение Пуассона с резким максимумом при $\bar{n} \gg 1$. Тогда мы можем воспользоваться разложением (3), заменяя γ_1 на γ_2 :

$$\gamma_2(\bar{n}) = \frac{1}{\Omega(\bar{n})} \left\{ [\hbar\varepsilon + W_2(\bar{n}) - W_1(\bar{n})](3f - 2g) + \frac{|V_{12}(0)|^2}{\hbar} (2\bar{n} + 3) \right\}, \quad (21)$$

$$f = \hbar \sum_k \left(\frac{|\beta_{1k}|^2}{\varepsilon_1 - \varepsilon_k + \hbar\omega} + \frac{|\beta_{2k}|^2}{\varepsilon_2 - \varepsilon_k - \hbar\omega} \right), \quad g = \hbar \sum_k \frac{|\beta_{1k}|^2}{\varepsilon_1 - \varepsilon_k + \hbar\omega} + f. \quad (22)$$

Разложением (3) мы можем воспользоваться и в случае, когда поле находится в сжатом состоянии, при выполнении условия (3) слабого сжатия.

Приближенное суммирование в (17) дает выражения, аналогичные однофотонному случаю, с той лишь разницей, что матричный элемент однофотонного перехода $\sqrt{n}|\beta|$ надо заменить матричным элементом двухфотонного перехода V_{12} и γ_1 надо заменить на γ_2 .

Особый интерес представляет случай точного двухфотонного резонанса, когда двухфотонная расстройка $\epsilon = \omega_0 - 2\omega = 0$. В этом случае частота Раби равна сумме штарковских сдвигов и линейно зависит от числа фотонов n :

$$2(n+2) = fn + g. \quad (23)$$

В этом случае можно суммирование в (17) провести точно, без использования разложения (3), для когерентного и сжатого состояний света. Подобная линейная зависимость частоты Раби от числа фотонов рассматривалась другими авторами в рамках модели Джейнса-Каммингса только в случае когерентного поля.

Производя суммирование в (17), для внешнего сжатого поля получим следующее выражение:

$$P_{z,a}(t) = 1 - \frac{2W_1(\bar{n}_s)W_2(\bar{n}_s)}{[W_1(\bar{n}_s) + W_2(\bar{n}_s)]^2} \left\{ 1 - |\lambda(t)|^{-1/2} \exp \left[\frac{|a|^2}{|\lambda(t)|^2} \Phi(t) \right] \times \right. \\ \left. \times \cos \left[\frac{|a|^2}{|\lambda(t)|^2} \chi(t) + gt - \frac{1}{2} \arg \lambda(t) \right] \right\}. \quad (24)$$

Результаты для когерентного состояния можно получить, если положить степень сжатия $r=0$, функции $\Phi(t)$, $\chi(t)$, $\lambda(t)$ определяются формулами (13), где вместо $\gamma_1(\bar{n}_s)$ надо положить величину f из (22).

Следует заметить, что период возрождений в случае нулевой расстройки перестает зависеть от интенсивности внешнего поля и определяется только параметрами атома

$$T_{2R} = \frac{2\pi}{f}. \quad (25)$$

Ширина распада Γ определяется формулой (16), где $\gamma_1(\bar{n}_s)$ заменяется на f .

Таким образом, в случае двухфотонного резонанса наблюдаются распады и возрождения осциллирующей населенности, как и в случае однофотонного резонанса. Однако период и ширина распада определяются новыми выражениями. В случае точного двухфотонного резонанса выражения становятся точными, а период возрождений перестает зависеть от интенсивности внешнего поля.

Данная работа частично поддерживалась грантом организации Сороса, присужденным Американским физическим обществом.

ЛИТЕРАТУРА

1. Р. Глаубер. Оптическая когерентность и статистика фотонов. В кн. Квантовая оптика и квантовая радиофизика. М., Мир, 1966.
2. Дж. Клаудер, Э. Сударшан. Основы квантовой оптики. М., Мир, 1970.
3. F. W. Cummings. Phys. Rev., A, **140**, 1051 (1965).
4. А. Д. Газаян. ЖЭТФ, **51**, 1864 (1966).

5. *M. Л. Тер-Микаелян. Нелинейная резонансная оптика. Препринт ИФИ 74—11, Ереван, 1974*
6. *G. Rempe, H. Walther. Phys. Script., 36, 135 (1987).*
7. *G. Rempe, H. Walther, N. Klein. Phys. Rev. Lett., 58, 353 (1987).*
8. *J. H. Eberly, N. B. Narozhny, J. J. Sanchez-Mondragon. Phys. Rev. Lett., 44, 1323 (1980).*
9. *N. B. Narozhny, J. J. Sanchez-Mondragon, J. H. Eberly. Phys. Rev., A, 23, 236 (1981).*
10. *D. F. Walls. Nature, 306, 141 (1983).*
11. *H. P. Yuen, Phys., Rev., A, 13, 2226 (1976).*
12. *A. J. Milburn. Opt. Act. 31, 671 (1984).*
13. *M. V. Satyanarayana, P. Rice, R. Vyas, H. J. Carmichael. JOSA B, 6, 228 (1989).*
14. *А. Д. Газазян. Изв. АН СССР, сер. физическая, 37, 2142 (1973).*

THE EFFECTS OF COLLAPSE AND REVIVAL OF POPULATION OSCILLATIONS IN RESONANT SQUEEZED LIGHT

A. D. GAZAZYAN, M. L. TER-MIKAELIAN, B. G. SHERMAN

This paper concerns the dynamics of the interaction between excited atom and quantized field in coherent or squeezed state. Cases of single and two photon resonance were investigated. A survey is done for quantum phenomena of collapse and revival in probability behaviour.

ԲՆԱԿԵՑՎԱԾՈՒԹՅԱՆ ՏՆՏԱՆՈՒՄՆԵՐԻ ԿՈԼԱՊՍԻ ՈՒ ՎԵՐԱԾՆՆԴԻ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԷՖԵԿՏՆԵՐԸ ՌԵԶՈՆԱՆՍԱՅԻՆ ՍՆՂՄՎԱԾ ԼՈՒՅՍԻ ԴԱՇՏՈՒՄ

Ա. Դ. ԳԱԶԱԶՅԱՆ, Մ. Լ. ՏԵՐ-ՄԻԿԱԵԼՅԱՆ, Բ. Գ. ՇԵՐՄԱՆ

Աշխատանքում դիտարկված է կոհերենտ սեղմված քվանտացված դաշտի հետ երկմակարդականի ատոմի փոխազդեցության դինամիկան: Ուսումնասիրված են միաֆոտոնային և երկֆոտոնային ռեզոնանսների դեպքերը: Դիտարկված են բնակեցվածության տատանումների կոլապսի և վերածննդի քվանտային երևույթները:

УДК 535.621.372

КАТАСТРОФЫ ПРИ ТЕПЛОВОМ ИЗМЕНЕНИИ ВРАЩАТЕЛЬНОЙ СПОСОБНОСТИ ХОЛЕСТЕРИЧЕСКОГО ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА

А. Р. МКРТЧЯН, С. Р. НЕРСИСЯН, Н. В. ТАБИРЯН

Институт прикладных проблем физики НАН Армении

(Поступила в редакцию 25 сентября 1992 г.)

Рассмотрена оптически бистабильная система на основе ячейки с холестерическим жидким кристаллом (ХЖК). Показано, что использование идеологии теории катастроф позволяет получить полную картину скачкообразных и гистерезисных явлений при управлении состоянием системы интенсивностью воздействующей ХЖК световой волны и параметрами ХЖК-среды.

1. Оптическая бистабильность продолжает привлекать внимание исследователей в связи с перспективой создания логических элементов оптических вычислительных устройств [1]. Большая ориентационная оптическая нелинейность мезофазы жидких кристаллов позволяет конструировать ряд схем бистабильности при весьма низкой интенсивности светового излучения и в очень тонких слоях нелинейной среды (см., например, [2—8]). В работе [8] обсуждались бистабильные схемы на основе тепловой-ориентационной нелинейности ХЖК. Был предложен ряд бистабильных схем, в которых нелинейность связана с поглощением падающего и отраженного светового излучения, с последующим изменением профиля спирали ХЖК. При этом могут меняться отражательное состояние, вращательная способность и т. д. Соответствующий эксперимент по бистабильности, связанный с изменением отражения, при нагревании ХЖК лазерным пучком проведен в работе [9].

Настоящая работа посвящена теоретическому исследованию схемы бистабильного устройства, в которой под воздействием светового излучения меняется вращательная способность ХЖК. Показано, что использование идеологии теории катастроф, связывающей возможные типы неустойчивостей системы с числом управляющих параметров [10], позволяет выявлять целый ряд явлений неустойчивостей и гистерезисов.

2. Рассмотрим ячейку с ХЖК в виде планарной текстуры Гранжана. Пусть на него падает нормально линейно поляризованная световая волна, частота которой находится далеко от полосы селективного отражения ХЖК. Тогда, при нагреве ХЖК из-за поглощения света будет меняться шаг спирали. Если на выходной плоскости ячейки заданы нежесткие условия закрепления для директора ХЖК (например, эта плоскость свободна), то это будет приводить к изменению

ориентации директора на этой же плоскости. Тогда поляризация световой волны, адиабатически следуя за поворотом директора, выйдет из ячейки также повернутой. Зависимость шага спирали h от температуры может быть довольно сложной [11]. Будем использовать простую зависимость $h \sim T^{-1}$. Тогда, при нагреве среды в поле световой волны на величину ΔT для угла поворота направления поляризации легко получить

$$\varphi = \varphi_0 \left(1 + \frac{\Delta T}{T_0} \right), \quad (1)$$

где $\Delta T = T - T_0$, T_0 — первоначальная температура ХЖК, $\varphi_0 = 2\pi L/h_0$, L — толщина ХЖК-ячейки, h_0 — равновесный шаг холестерической спирали в отсутствие световой волны. Допустим далее, что излучение попадает на поляризатор с установленным вплотную полупрозрачным зеркалом и, частично отражаясь, на обратном пути также поглощается в слое ХЖК (рис. 1). Тогда ячейка будет нагреваться в поле двух световых волн и для ΔT приближенно можно записать

$$\Delta T \approx \frac{\alpha \tau}{\rho C_p} (I' + I''). \quad (2)$$

В (2) α (см $^{-1}$) — коэффициент поглощения среды, ρC_p — теплоемкость единицы объема среды, τ — время тепловой релаксации: $\tau \approx L^2/\chi\pi^2$, χ — коэффициент температуропроводности, I' — интенсивность падающей

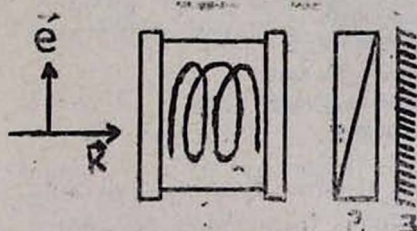


Рис. 1. Бистабильная схема на основе ХЖК-ячейки: 1 — ячейка ХЖК с планарной ориентацией, 2 — поляризатор, скрещенный с поляризацией падающей волны, 3 — зеркало, e — орт поляризации, k — волновой вектор падающей волны.

волны, I'' — интенсивность отраженной волны. Имея в виду наличие поляризатора, который скрещен с поляризацией падающей волны, для I' и для интенсивности волны I'' , прошедшей сквозь все устройство, будем иметь

$$I' = I' R \sin^2 \varphi; \quad I'' = I' (1 - R) \sin^2 \varphi. \quad (3)$$

При записи формул (2), (3) мы считали поглощение малым и пренебрегали ее дихроизмом.

Как видно из формул (1) — (3), величины φ и I' определяются набором большого числа параметров I' , h_0 , L , R , α , T_0 и поэтому ис-

следование всех особенностей работы данного устройства представляется сложной задачей.

3. В качестве управляющих параметров выберем безразмерную величину $A = (\alpha \tau / \epsilon C_p T_0) I^2$ и φ_0 . Уравнение (1) с учетом формул (2), (3) нами решено численно для $R = 0,9$. Некоторые результаты представлены на рис. 2—4.

На рис. 2, а приведена зависимость угла поворота φ направления поляризации прошедшей сквозь систему волны от параметра A

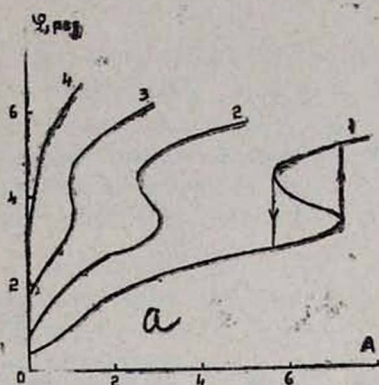


Рис. 2, а. Зависимость угла поворота φ направления поляризации прошедшей сквозь устройство волны от параметра A , для некоторых значений параметра φ_0 : 1— $\varphi_0 = \pi/8$; 2— $\varphi_0 = \pi/4$; 3— $\varphi_0 = \pi/2$; 4— $\varphi_0 = \pi$. На кривой 1 стрелками показаны направления скачков величины φ .

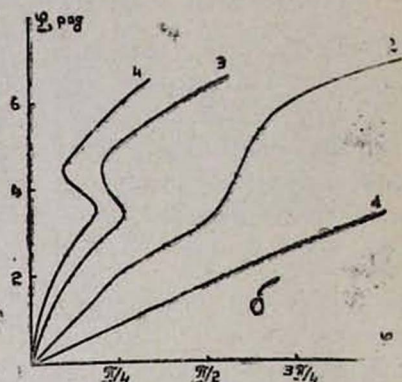


Рис. 2, б. Зависимость величины φ от параметра φ_0 для некоторых значений параметра A : 1— $A = 0,1$; 2— $A = 1$; 3— $A = 3$; 4— $A = 6$.

для разных значений другого параметра φ_0 . Как мы видим, для φ_0 меньше значения $\varphi_0^* \approx 5\pi/8$ увеличение параметра A и обратное его уменьшение приводят к скачкам величины φ . Ширина полученной таким образом петли гистерезиса и соответствующие величины скачков с уменьшением φ_0 увеличиваются. Подобная картина наблюдается и в зависимости $\varphi = \varphi(\varphi_0)$ для значений параметра A больше $A^* \approx 1,5$ (рис. 2, б).

Одновременно с φ подобные скачки возникают также в пропускании системы I^2/I^1 (рис. 3).

Полную картину возможных скачкообразных и гистерезисных процессов дает «поверхность равновесия» $\varphi = \varphi(A, \varphi_0)$ (рис. 4).

4. Величины A и φ_0 , кроме интенсивности падающего света, включают в себя также и параметры ХЖК среды. Следовательно, управление можно вести с помощью конкретно выбранной пары этих параметров. При этом ХЖК предоставляет ряд возможностей, как например, задание спектральной области поглощения при помощи внедрения соответствующих красителей в ХЖК, плавное изменение шага спирали при использовании разных процентных составов холестерич-

ческой примеси в нематическом веществе или же приложением к ячейке статических магнитных либо электрических полей.

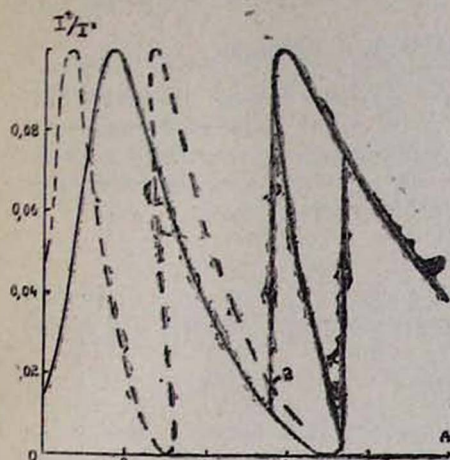


Рис. 3. Зависимость пропускания системы I'/I от параметра A , для двух значений параметра φ_0 : 1— $\varphi_0=\pi/8$, 2— $\varphi_0=\pi/4$. Стрелками показаны направления скачков величины I'/I .

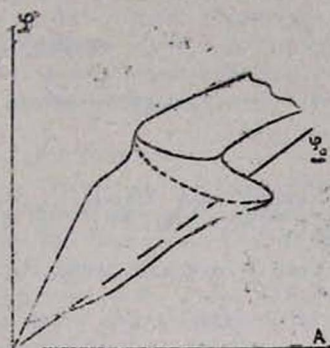


Рис. 4. Поверхность равновесия $\varphi = \varphi(\varphi_0, A)$.

Сделаем численные оценки для характерных значений интенсивности света I' . Для параметров ХЖК $L=10^{-2}\text{см}$, $\chi=10^{-3}\text{см}^2/\text{с}$, $\rho C_p=1\text{Дж}/\text{см}^3\text{К}$, $\sigma=10\text{см}^{-1}$ получим $\tau\sim 10^{-2}\text{с}$ и при $T_0=300\text{К}$, $A\sim 1$ будем иметь $I'\sim 10\text{Вт}/\text{см}^2$. Характерные величины скачков составляют: $\Delta\varphi\sim 2\text{рад}$, $\Delta I'\sim 1\text{Вт}/\text{см}^2$.

Таким образом, взгляд на обсуждаемый процесс, как на «катастрофу» вращательного состояния ХЖК, позволяет выявлять все возможные виды неустойчивостей и гистерезисов, которые могут возникнуть в данной системе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Х. Гиббс. Оптическая бистабильность. Управление светом с помощью света. М., Мир, 1988.
2. I. C. Khoo, J. Y. Hou, R. Normandin, V. C. Y. So. Phys. Rev., A 27, 3251 (1983).
3. I. C. Khoo, R. Normandin, V. C. Y. So. Appl. Phys., 53, 7599 (1982).
4. M. M. Cheung, S. D. Durbin, I. R. Shen. Optics Letts., 8, 39 (1983).
5. J. E. Bjorkholm, P. W. Smith, W. J. Tomlinson, A. E. Kaplan. Optics Letts., 6, 345 (1981).
6. I. C. Khoo, Appl. Phys. Letts., 41, 909 (1982).
7. Н. В. Кухтарев. УФЖ, 27, 291 (1982).
8. Б. Я. Зельдович, Н. В. Табиров. Квантовая электроника, 11, 2419 (1984).
9. Р. Б. Алавердян, С. М. Аракелян, Ю. С. Чилингарян. Письма в ЖЭТФ, 9, 366 (1985).
10. В. И. Арнольд. Теория катастроф. М., Изд. МГУ, 1983. Т. Постон, И. Стюарт. Теория катастроф и ее приложения. М., Мир, 1980.
11. В. В. Беляков, А. С. Сонин. Оптика холестерических жидких кристаллов. М., Наука, 1982.

ԱՂԵՏՆԵՐ ԽՈՂԵՍՏԵՐԻԿ ՀԵՂՈՒԿ ԲՅՈՒՐԵՂԻ ՊՏՏՈՂԱԿԱՆ
ԸՆԴՈՒՆԱԿՈՒԹՅԱՆ ԶԵՐՄԱՅԻՆ ՓՈՓՈԽՈՒԹՅԱՆ ԺԱՄԱՆԱԿ

Ա. Ռ. ՄԿՐՏՉՅԱՆ, Ս. Ռ. ՆԵՐՍԻՍՅԱՆ, Ն. Վ. ԹԱՐԻՐՅԱՆ

Դիտարկված է խոլեստերիկ հեղուկ բյուրեղով (ԽՀԲ) բջիջի հիման վրա օպտիկական երկ-
կայուն համակարգի: Ցույց է տրված, որ աղետների տեսության դադափարախոսության օգ-
տագործումը թույլ է տալիս ստանալու ընդհանուր և հիստերեզիսային երևույթների ամբողջա-
կան պատկերը՝ համակարգի վիճակը ԽՀԲ-ի վրա ազդող լուսային ալիքի ինտենսիվությամբ
և ԽՀԲ-ական միջավայրի պարամետրերով կառավարելու ժամանակ:

CATASTROPHES TAKE PLACE BY A THERMAL CHANGE OF THE
ROTATIONAL ABILITY OF THE CHOLESTERIC LIQUID CRYSTAL

A. R. MKRTCHYAN, S. R. NERSISYAN, N. V. TABIRYAN

An optic bistable system on the basis of the cell with a cholesteric liquid crystal (CLC) is considered. It is shown that the using of the ideology of the catastrophes theory permits us to get the full image of the jump-like and hysterical phenomena controlling the state of the system by the intensity of the light wave, wich influences the CLC and the CLC-medium parameters.

ВЫРАЩИВАНИЕ МОНОКРИСТАЛЛОВ ФТАЛОЦИАНИНА СВИНЦА МОНОКЛИННОЙ И ТРИКЛИННОЙ МОДИФИКАЦИЙ

М. В. СИМОНЯН, Э. Г. ШАРОЯН

Институт физических исследований НАН Армении

(Поступила в редакцию 28 января 1993 г.)

Исследованы закономерности роста монокристаллов фталоцианина свинца ($PbPc$) моноклинной и триклинной модификаций в замкнутых системах при наличии резкого температурного градиента. Получены значительно большие, по сравнению с проточной методикой, монокристаллы $PbPc$ моноклинной и триклинной модификаций с максимальными размерами $5 \times 0,01 \times 0,05$ мм³ и $7 \times 1 \times 0,1$ мм³ соответственно. Установлены оптимальные условия для выращивания больших и качественных монокристаллов $PbPc$ и исследовано влияние электрического поля на процессы роста.

Металлфталоцианины (MPc , где $Pc = C_{32}H_{16}N_8$, M —большинство металлов периодической системы)—известный класс металлоорганических соединений, обладающих рядом уникальных свойств, представляющих большой научный и практический интерес [1, 2]. С точки зрения электрических свойств, все MPc являются высокоомными полупроводниками, однако добавление сильных электронных акцепторов или доноров приводит к резкому повышению электропроводности. В некоторых случаях возможно получение квазиодномерных соединений, обладающих металлической электропроводностью, как например, $NiPcI$, $NiPc(AsF_6)_{0.5}$, $CuPcI_{3(1+6)}$ и т. д. [3, 4, 5].

Как квазиодномерный органический металл, особый интерес представляют образцы фталоцианина свинца моноклинной модификации— $PbPc(M)$, пленки которого проявляют металлическую зависимость электропроводности от температуры без всякого допирования [6]. На пленках $PbPc(M)$ наблюдался также эффект электрического переключения— фазовый переход типа металл—изолятор, при котором электропроводность меняется на 10 порядков [7]. Основное отличие молекул $PbPc$ от других MPc в следующем: в то время как все молекулы MPc плоские и центральный ион металла находится в плоскости молекулы (симметрия D_{4h}), молекулы $PbPc$ имеют воланообразную форму (симметрия C_{4v}), ион Pb^{2+} отклонен от плоскости макрокольца на $0,4 \text{ \AA}$, что приводит к образованию электрического дипольного момента [7]. Отличие формы молекул $PbPc$ от других MPc приводит к существенному отличию образуемых ими кристаллов. Из многочисленных модификаций MPc хорошо известна наиболее стабильная β -модификация. В случае $PbPc$ к настоящему времени известны две кристаллические модификации: моноклинная— $PbPc(M)$ и триклинная— $PbPc(T)$ [8, 9].

Кристаллы $PbPc(M)$ принадлежат к пространственной группе

Pb_2I_6 с параметрами решётки $a=b=25,48\text{Å}$, $c=3,73\text{Å}$, $\gamma=90^\circ$. В элементарной ячейке 4 молекулы $PbPc$, рассчитанная плотность $1,98\text{г}\cdot\text{см}^{-3}$. В кристаллах $PbPc(M)$ молекулы $PbPc$ расположены стопками и ионы Pb^{2+} образуют одномерные цепочки вдоль оси C . Межионное расстояние $Pb^{2+}-Pb^{2+}=3,73\text{Å}$, что не намного больше расстояния ионов Pb^{2+} в металлическом свинце ($3,48\text{Å}$). Стопчатое расположение молекул $PbPc$ обуславливает металлическую электропроводность вдоль оси C [6]. Кристаллы триклинной модификации $PbPc$ принадлежат к пространственной группе $\bar{P}1$ (класс симметрии C_1), параметры решётки $a=13,123\text{Å}$, $b=16,131\text{Å}$, $c=12,889\text{Å}$, $\alpha=94,22^\circ$, $\beta=96,20^\circ$, $\gamma=114,92^\circ$; в элементарной ячейке 4 молекулы, рассчитанная плотность $1,95\text{г}\cdot\text{см}^{-3}$.

В настоящей работе для получения больших и качественных монокристаллов $PbPc$ использован предложенный нами ранее новый метод выращивания монокристаллов MPc в замкнутых системах (ампулах) при наличии резкого температурного градиента ($\sim 100\text{ град}\cdot\text{см}^{-1}$) [10]. Оказалось, что этой методикой возможно одновременное получение монокристаллов $PbPc$ моноклинной и триклинной модификаций. Исследованы зависимости скоростей роста монокристаллов от давления инертного газа в ампуле и найдены оптимальные условия для получения больших и качественных монокристаллов. Исследовано также влияние электрического поля на процессы роста монокристаллов $PbPc$.

Принятым методом выращивания монокристаллов $PbPc$ является проточный метод роста [11]. Для транспортировки паров фталоцианинов из зоны сублимации в зону кристаллизации используется поток инертного газа, при давлениях несколько Торр. Температура зоны сублимации поддерживается постоянной $T=420^\circ\text{C}$, монокристаллы $PbPc$ растут при двух разных температурах: 370° и 220°C . Монокристаллы, выращенные при 370°C , принадлежат к триклинной, а при 220°C — к моноклинной модификации.

Схема нашей установки для выращивания монокристаллов $PbPc$ и распределение температуры вдоль ростовой трубки представлены на рис. 1. Поликристаллические образцы $PbPc$ помещались в трубку из пирекса диаметром 1 см и длиной $\sim 20\div 30$ см. Ампула откачивалась до 10^{-3} Торр и заполнялась инертным газом (аргоном или азотом) с давлениями $10^{-1}\div 10^3$ Торр при комнатной температуре. Часть ампулы, где находится порошок фталоцианина свинца, помещается в печь с равномерным нагревом, другая часть — вне зоны нагрева, т. е. при комнатной температуре. Такая геометрия ростовой системы позволяет получать резкий температурный градиент ($\sim 100\text{ град}\cdot\text{см}^{-1}$) на краю печи. Гетерогенное зарождение и рост монокристаллов $PbPc$ триклинной и моноклинной модификации происходили в зонах «а» и «б», соответственно (рис. 1). Температура в зонах сублимации и конденсации поддерживалась постоянной (с точностью $\pm 2^\circ\text{C}$) и соответствовала 520° , 420° и 230°C .

На подобной установке нами ранее выращивались монокристаллы других фталоцианинов [10]. На примере $CuPc$ были получены закономерности роста монокристаллов в замкнутых системах при резком температурном градиенте (~ 100 град·см $^{-1}$). Но если в случае $CuPc$ и других MPc получаются монокристаллы только β -модификации при температуре конденсации $\sim 420^\circ C$, то в случае $PbPc$ одно-

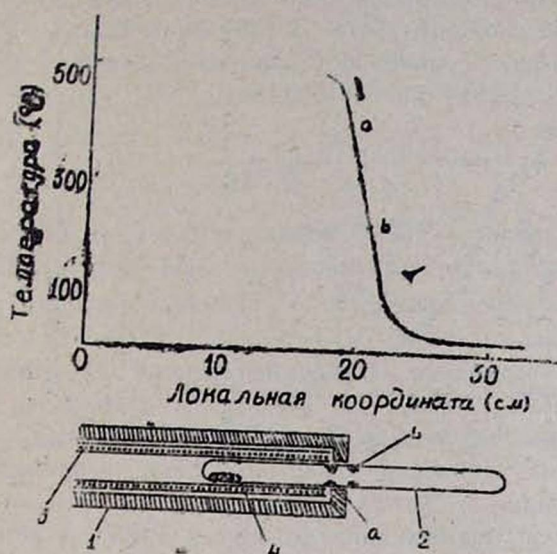


Рис. 1. Схема установки для выращивания монокристаллов $PbPc$ и распределение температуры вдоль ампулы: 1—металлический кожух, 2—пирексовая ампула, 3—спираль нагревателя, 4—порошок фталоцианина, «а» и «б»—зоны кристаллизации монокристаллов $PbPc(T)$ и $PbPc(M)$ соответственно.

временно растут монокристаллы двух модификаций. Монокристаллы $PbPc$, полученные при высокой температуре конденсации ($420^\circ C$), принадлежат к триклинной модификации и имеют форму прямоугольных параллелепипедов, сечения которых мало меняются от давления инертного газа и составляют $\sim 1 \times 0,1$ мм 2 . Монокристаллы, растущие при низких температурах ($\sim 230^\circ C$), — моноклинной модификации. Они имеют игольчатый габитус, поперечное сечение $0,01 \times 0,005$ мм 2 , которое практически не зависит от давления инертного газа в интервале $1 \leq P_{Ar} \leq 300$ Торр. Наиболее крупные и наиболее совершенные монокристаллы $PbPc$ получены при давлениях $100 \leq P_{Ar} \leq 300$ Торр для моноклинной модификации и $600 \leq P_{Ar} \leq 1000$ Торр для триклинной. Средние размеры полученных монокристаллов составляли $4 \times 0,01 \times 0,005$ мм 3 для моноклинных и $5 \times 1 \times 0,1$ мм 3 — для триклинных. Наиболее длинные кристаллы достигали длины 5 и 7 мм соответственно.

Зависимости скоростей роста монокристаллов моноклинной и триклинной модификаций от давления инертного газа приведены на

рис. 2а. Кривые $v \sim f(P_{Ar})$ имеют вид, аналогичный случаю β -CuPc [10]. Наличие максимума у этих кривых связано с тем, что вначале увеличение давления инертного газа приводит к улучшению теплоотвода скрытой теплоты кристаллизации от растущих кристаллов, что и стимулирует скорость роста; при высоких давлениях инертного газа поток паров фталоцианина лимитируется диффузией, что приводит к уменьшению скорости роста. В [10] нами было получено выражение скорости роста монокристаллов для случая, когда одновременно растет множество монокристаллов:

$$\bar{v} = \frac{M}{t \cdot \rho \cdot n_0 \cdot \bar{S} \cdot \Delta S} \quad (1)$$

где $\bar{v}$ —средняя скорость роста монокристаллов, M/t —поток массы, ρ —плотность кристаллов, ΔS —площадь зоны кристаллизации, n_0 —число кристаллов, приходящихся на единицу площади, $\bar{S}$ —среднее сечение кристаллов.

На рис. 2б приведены экспериментальные значения M/t для PbPc в зависимости от P_{Ar} . Как следует из кривых на рис. 2б, во всем исследованном интервале P_{Ar} $(M/t)_{\text{трикл.}} > (M/t)_{\text{монокл.}}$. M/t явно зависит только от давления инертного газа, и приведенное выше неравенство, очевидно, является результатом того, что зона кристаллизации триклинной модификации находится ближе к источнику, чем моноклинной, при прочих не очень разных условиях. Другой важный параметр, определяющий скорость роста,—это число растущих кристаллов n_0 . Оно зависит от многих факторов, в основном определяющих теплоотвод скрытой теплоты кристаллизации: температурного градиента, давления инертного газа, теплоты сублимации, температуры кристаллизации и пр. На основании наших экспериментов, проведенных при плавном (~ 20 град·см $^{-1}$) [12] и резком температурных градиентах (~ 100 град·см $^{-1}$) [10], а также настоящих опытов, можно утверждать, что всегда наблюдаемое увеличение $\bar{v}$ с ростом давления инертного газа в начальном интервале давлений, очевидно, обусловлено улучшением теплоотвода благодаря инертному газу. В случае PbPc падение скорости роста имеет место при $P_{Ar} > 100$ Торр и $P_{Ar} > 600$ Торр для моноклинной и триклинной модификаций, соответственно. Так как при этих давлениях необходимый теплоотвод обеспечивается, мы полагаем, что более быстрое падение скорости роста с P_{Ar} у моноклинной модификации по сравнению с триклинной обусловлено, по-видимому, более ранним убыванием M/t .

Для выращивания только монокристаллов PbPc моноклинной модификации нами использована другая установка, в которой рост монокристаллов триклинной модификации в данных режимах невозможен (см. рис. 3). Область кристаллизации (а) охлаждалась воздушным потоком, и температура конденсации не превышала 230°C, температура в зоне испарения $\sim 450^\circ\text{C}$, $P \leq 10^{-3}$ Торр. В этом случае

получены только монокристаллы $PbPc(M)$, которые растут перпендикулярно подложке. Наибольшая длина полученных на этой установке монокристаллов $PbPc(M) \sim 8 \div 10$ мм.

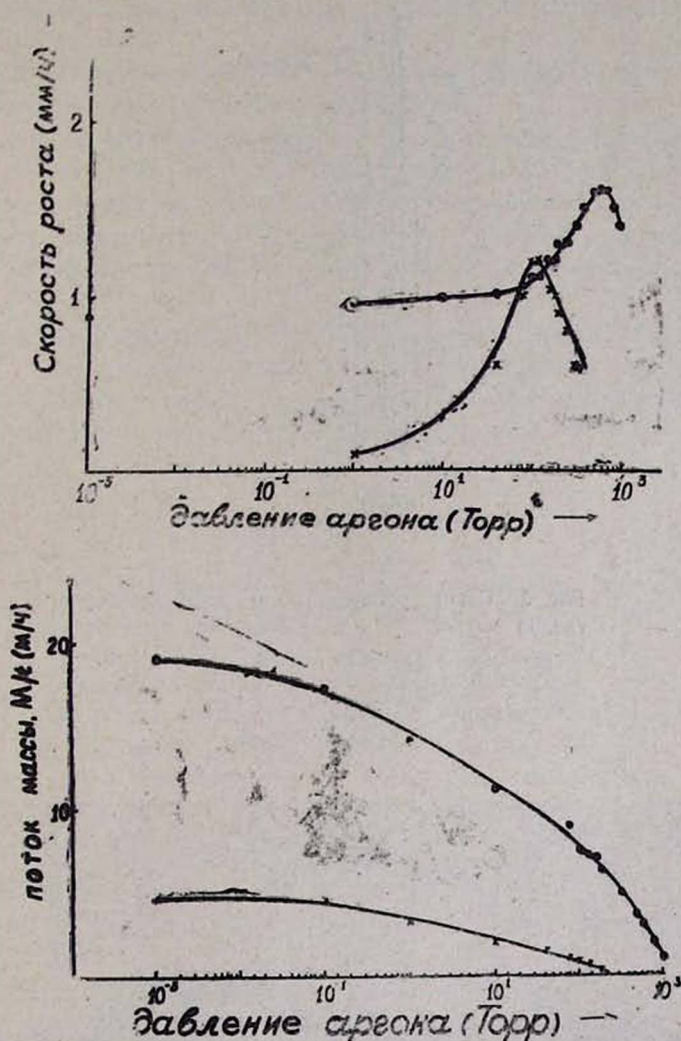


Рис. 2. Зависимость скоростей роста (а) и потока массы (б) при росте монокристаллов $PbPc(M)$ (x) и $PbPc(T)$ (·).

Учитывая наличие электрического дипольного момента молекул $PbPc$, представляется интересным изучение влияния электрического поля при выращивании монокристаллов $PbPc$. Эксперименты с приложением электрического поля проведены на установке, представленной на рис. 4. Напряжение высоковольтного источника питания подавалось после появления зародышей монокристаллов $PbPc$ в зоне кристаллизации. Значения прикладываемых полей в области роста составляли $1 \div 2$ кВ·см⁻¹. Воздействия электрического поля сводятся к следующим наблюдаемым эффектам:

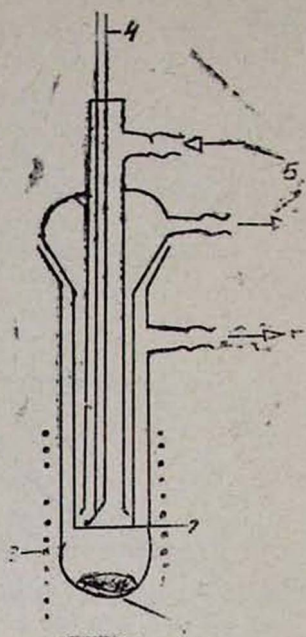


Рис. 3. Схема установки для роста монокристаллов $PbPc$ (M) с охлаждаемой подложкой: 1—полукристаллическая шихта $PbPc$, 2—охлаждаемая подложка, 3—витки нагревателя, 4—термопара, 5—воздушный поток, 6—к вакуумной системе.

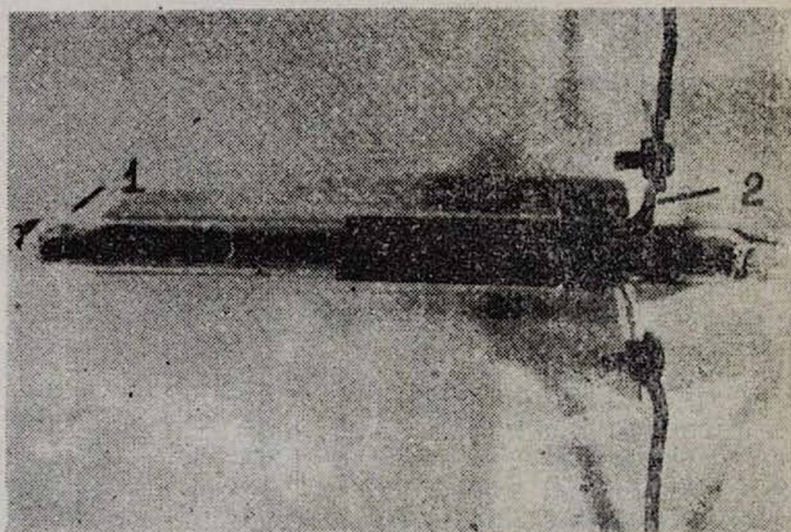


Рис. 4. Ячейка для выращивания монокристаллов $PbPc$ (M) при наличии электрического поля: 1—пирексовая ампула с веществом, 2—стальные электроды.

—подавляется рост монокристаллов триклинной модификации; монокристаллы $PbPc(M)$ растут преимущественно в направлении приложенного электрического поля, в то время как при отсутствии электрического поля все радиальные направления, естественно, были эквивалентными;

—появляется множество мелких зародышей $PbPc(M)$ в той части ампулы, где приложено электрическое поле.

—удельная электропроводность монокристаллов $PbPc(M)$ увеличивается от значений $10^{-4} \div 10^{-8} \text{ ом}^{-1} \text{ см}^{-1}$ до $10^{-3} \div 10^{-5} \text{ ом}^{-1} \text{ см}^{-1}$.

Средние размеры монокристаллов, которые выращены при наличии электрического поля, $3 \times 0,1 \times 0,005 \text{ мм}^3$. При достижении отмеченных размеров внутри ростовой ампулы наблюдаются пробойные явления.

Резюмируя вышеописанные эксперименты, можно заключить, что выявлены оптимальные условия для выращивания монокристаллов $PbPc$ в замкнутых системах при резком температурном градиенте. Получены большие и качественные монокристаллы $PbPc(M)$ и $PbPc(T)$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ж. Симон, Ж. Ж. Андре. Молекулярные полупроводники. М., Мир, 1988.
2. P. H. Moser, A. L. Thomas, Phthalocyanine Compounds. New-York, Reinhold-Publ. Corp. 1963.
3. C. J. Schramm, et al. J. Am. Chem. Soc. **102**, 6702 (1980).
4. K. Yakushi, et al. J. Bull. Chem. Soc. Jpn. **62**, 687 (1989).
5. E. G. Sharoyan, H. A. Samuelyan, Phys. Stat. Sol. (a), **79**, k213 (1982).
6. K. Ueki, K. Takamoto, E. Konda, Phys. Lett. **45A**, 345 (1973).
7. C. Hamann, H. I. Hohne, et al. Phys. Stat. Sol. (a), **50**, 189 (1978).
8. K. Ueki, Acta Cryst., **B29**, 2290 (1973).
9. Y. Iyechika, K. Yakushi, I. Ikemoto, H. Kuroda, Acta Cryst. **B38**, 766 (1982).
10. M. V. Simonyan, E. G. Sharoyan, et al. Crystal Res. Technol., **19**, 441 (1984).
11. K. Ueki, J. Phys. Soc. Japan, **40**, 140 (1976).
12. Э. А. Маркосян, А. А. Самуэлян, Э. Г. Шароян. Журнал физической химии, **47**, 184, (1973).

CRYSTAL GROWTH OF MONOCLINIC AND TRICLINIC MODIFICATIONS OF LEAD PHTHALOCYANINE

M. V. SIMONYAN, E. G. SHAROYAN

Growth regularities of monoclinic and triclinic modifications of lead phthalocyanine ($PbPc$) single crystals in the closed systems at steep temperature gradients have been investigated. As compared with the flowing method, larger size single crystals of monoclinic and triclinic modifications of $PbPc$ (up to $5 \times 0,01 \times 0,005 \text{ мм}^3$ and $7 \times 1 \times 0,1 \text{ мм}^3$) have been obtained. The influence of the electric field on the growth process has been investigated. The optimal conditions for growth of large, high-quality single crystals have been determined.

УДК 538.662.1:546.54

СПОНТАННАЯ ПОВЕРХНОСТНАЯ КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ КАДМИЯ
В СПЛАВАХ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ С Cd И Zn СО
СТРУКТУРОЙ ТИПА $CsCl$

В. Е. АДАМЯН, А. А. АРЦРУНИ, Э. С. АБОВЯН, М. А. МЕЛИКЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 20 апреля 1993 г.)

Обнаружено спонтанное образование кристаллического кадмия в поверхностном слое некоторых образцов системы твердых растворов $(Gd_{x_0}La_{1-x_0})_tY_{(1-x_0)(1-t)}(Zn_tCd_{1-t})(0 \leq t \leq 1)$. Исследована кинетика процесса, оценена толщина образовавшегося слоя. Рассмотрен возможный механизм явления.

В [1, 2] приведены результаты исследования магнитных характеристик многокомпонентных твердых растворов $A \equiv (Gd_{x_0}La_{1-x_0})_tY_{(1-x_0)(1-t)}(Zn_tCd_{1-t})(0 \leq t \leq 1)$ со структурой типа $CsCl$, в которых с изменением состава (т.е. с изменением t) остаются неизменными такие параметры, влияющие на магнитные свойства, как постоянная решетки, концентрации магнитоактивных ионов и электронов проводимости.

В этой системе твердых растворов с изменением t замещения проводятся как в первой (Cd замещается на Zn), так и во второй (Y замещается на La) координационных сферах вокруг иона Gd . Показано, что на магнитные свойства влияют только замещения в первой координационной сфере, т.е. в лигандном окружении иона Gd .

В настоящей работе рассматривается обнаруженное и исследованное с помощью рентгеновского анализа образование кристаллического кадмия в поверхностном слое некоторых образцов вышеуказанной системы твердых растворов.

Рентгендифракционные картины образцов получены на дифрактометре ДРОН-2 с использованием монохроматизированного излучения трубки с кобальтовым анодом ($\lambda = 0,179026$ нм). Съемка проводилась с поверхности вращающегося плоского среза образца.

Было замечено, что поверхность образцов начала ряда (исследовалось 7 образцов с $t = 0; 0,1; 0,2; 0,5; 0,6; 0,8; 1,0$) после шлифовки достаточно быстро покрывалась слоем темного налета.

Расшифровка дифрактограмм, снятых с образцов, покрытых налетом, показала наличие в них почти полного набора дифракционных линий кристаллического кадмия, причем их интенсивность и количество уменьшаются от образца к образцу по мере удаления от начала ряда.

Было установлено, что после очистки поверхности вместе с нарастанием слоя налета возникает и усиливается серия рефлексов,

принадлежащих структуре кристаллического кадмия, с одновременным уменьшением интенсивности рефлексов от основной структуры твердого раствора. Это экспериментальное наблюдение однозначно указывает на то, что после очередной очистки поверхности образца происходит спонтанное разложение приповерхностного слоя твердого раствора с образованием кристаллического кадмия. Процесс достигает насыщения и практически прекращается через 0,5—2,5 часа. Это время тем короче, чем выше содержание кадмия в образце.

Чтобы получить представление о кинетике роста кристаллического кадмия, было проведено исследование временной зависимости изменения интенсивности отдельных рефлексов как кристаллического кадмия (рефлекс (002), $2\theta=37,2^\circ$), так и твердого раствора (рефлекс (110), $2\theta=39,5^\circ$). С этой целью сразу после очистки поверхности образца от налета на диаграммной ленте дифрактометра записывался ход изменения интенсивности рефлекса со временем. При этом детектор дифрактометра предварительно устанавливался в положение, соответствующее максимуму интенсивности данного рефлекса. Полученные дифрактограммы для рефлекса кадмия от образцов A1 и A2 с $t=0$ и $t=0,1$ представлены на рисунках 1 и 2. Как видно из рис. 1, интенсивность вначале быстро возрастает (скорость $\sim 0,2$ имп/с²) и через 7—8 минут после начала записи достигает примерно 70% максимального значения. Затем рост интенсивности замедляется и практически полностью прекращается примерно через 20 часов, достигая для данного образца определенного максимального значения. Для образца A2 (рис. 2) как скорость роста ($4 \cdot 10^{-3}$ имп/с²), так и максимальное значение интенсивности малы по сравнению с образцом A1.

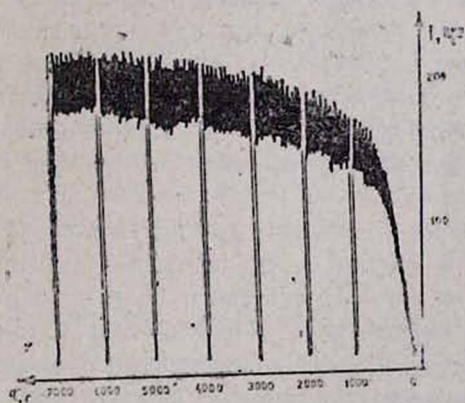


Рис. 1. Изменение интенсивности максимума линии (002) кадмия со временем после очистки поверхности образца A1.

Значение максимальной интенсивности рефлекса кадмия, соответствующее концу процесса распада твердого раствора, пропорционально глубине поверхностного слоя, в котором образуется кристаллический кадмий. Сравнение экспериментальных кривых (рис. 1 и 2) показывает,

что толщина образующегося слоя кадмия уменьшается с уменьшением его процентного содержания в ряду твердых растворов.

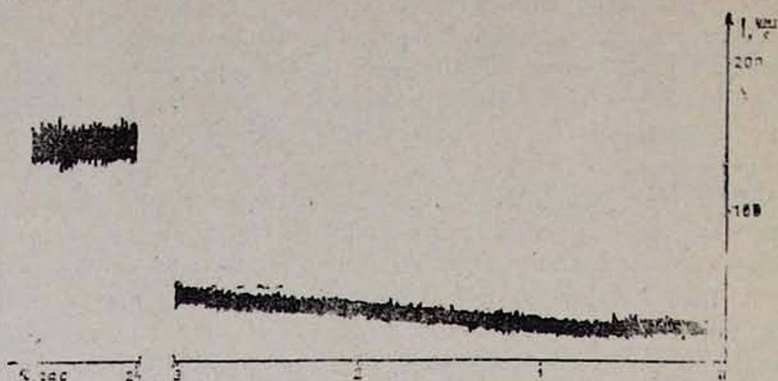


Рис. 2. Изменение интенсивности максимума линии кадмия (002) со временем после очистки поверхности образца А2.

Предпринимались попытки разными способами повлиять на динамику распада кристаллической решетки твердого раствора в граничной области. В частности, на поверхность образца после очистки наносились покрытия из различных смазок и лаков. Однако ни одно из испытанных веществ не предохраняло поверхность от образования налета, а лишь уменьшалась скорость его нарастания. Из примененных покрытий наиболее эффективно замедлял рост налета слой вакуумной смазки. Например, при покрытии поверхности образца А1 после шлифовки слоем вакуумной смазки скорость роста интенсивности рефлекса (002) кристаллического кадмия уменьшалась примерно в 30 раз. Дальнейшие опыты показали, что при помещении образца с защищенной поверхностью в вакуум или инертную среду налет не образуется. Выяснилось, что кристаллизация кадмия на поверхности происходит только при наличии кислорода. При этом на дифрактограммах не наблюдаются дополнительные рефлексы от структур окисей иттрия и гадолиния.

Для сравнения изменений интенсивностей рефлексов от решетки кристаллического кадмия и от основной решетки твердого раствора в процессе роста приповерхностного слоя на образце А1 был поставлен следующий эксперимент. Детектор дифрактометра поочередно наводился на линию (002) кристаллического кадмия ($2\theta = 37,2^\circ$) и на линию (110) решетки твердого раствора ($2\theta = 39,5^\circ$). В течение $\tau = 100$ с отсчитывалось количество импульсов от каждого из рефлексов с одновременной записью на диаграммной ленте. Такая процедура была проделана как с отшлифованной и незащищенной поверхностью, так и с поверхностью, покрытой после очистки вакуумной смазкой. Эксперимент был многократно повторен. Графики изменения интенсивностей со временем, пересчитанные на одну секунду, построенные по результатам одного из экспериментов, приведены на рис. 3.

Полученные экспериментальные кривые аппроксимируются следующими аналитическими выражениями:

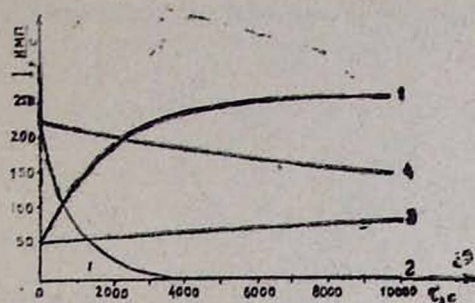


Рис. 3. Графики изменения максимумов интенсивностей линии кадмия (002) (кривые 1 и 3) и линии твердого раствора (110) (кривые 2 и 4), пересчитанные на одну секунду.

1. Кривая 1 соответствует изменению со временем интенсивности рефлекса (002) от решетки кадмия ($2\theta = 37,2^\circ$).

$$I_1(\tau) = B + C[1 - \exp(-\alpha\tau)].$$

где $C = 205$, $\alpha = 5,5 \cdot 10^{-4}$. Постоянная B зависит от количества кристаллического кадмия, оставшегося на поверхности образца после ее очистки. В данном конкретном эксперименте $B = 50$.

2. Кривая 2 соответствует изменению со временем интенсивности рефлекса (110) от решетки твердого раствора ($2\theta = 39,5^\circ$).

$$I_2(\tau) = 220 \cdot \exp(-1,1 \cdot 10^{-3}\tau).$$

В обоих случаях поверхность не защищена.

Кривые 3 и 4 описывают временные зависимости интенсивностей тех же рефлексов кристаллического кадмия (I_3) и твердого раствора (I_4), полученные с защищенной слоем вакуумной смазки поверхности образца:

$$I_3(\tau) = 50 + 3 \cdot 10^{-3}\tau,$$

$$I_4(\tau) = 220 \cdot \exp(-4,4 \cdot 10^{-5} \cdot \tau).$$

Нетрудно заметить, что скорость изменения интенсивности рефлекса кадмия меньше скорости изменения интенсивности рефлекса твердого раствора. Для качественного объяснения этого различия рассмотрим рис. 4, на котором изображена приграничная область сплава. На поверхность падает пучок рентгеновского излучения под брэгговским углом исследуемого рефлекса. Максимальная глубина проникновения излучения в образец равна α .

В начальный момент интенсивность дифрагированного излучения от структуры твердого раствора максимальна, но со временем она

уменьшается. Это связано с уменьшением объема твердого раствора в приповерхностном слое и, следовательно, его доли в формировании дифрагированного пучка. При образовании слоя кадмия толщиной x в соответствии со стехиометрическим составом твердого раствора не-

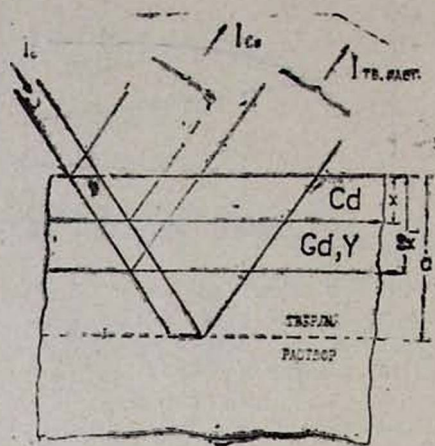


Рис. 4. Схема, поясняющая причину различия скоростей изменения интенсивностей рентгеновских рефлексов от кристаллического кадмия и от структуры твердого раствора. a —максимальная глубина проникновения рентгеновских лучей в твердый раствор.

обходимо разрушение слоя сплава толщиной $2x$. Отсюда ясно, что скорость уменьшения интенсивности рефлекса твердого раствора должна быть больше скорости увеличения интенсивности рефлекса кадмия. Отметим, что средний коэффициент поглощения твердого раствора и его разрушенного слоя практически одинаковы.

Проведенные исследования не позволяют разработать удовлетворительный механизм, объясняющий образование кадмия на поверхности твердых растворов. Сделана лишь попытка объяснить явление, исходя из следующих соображений.

Элементарная ячейка исследованных твердых растворов представляет собой куб, в вершинах которого расположены ионы редкоземельных металлов, а в центре куба находятся ионы Cd и Zn (в образце $A1$ центры ячеек заняты только ионами Cd).

Ионные радиусы редкоземельных металлов больше, чем у Cd и Zn ($R_{La}=0,187$ нм; $R_{Gd}=0,180$ нм; $R_{Y}=0,181$ нм; $R_{Cd}=0,152$ нм; $R_{Zn}=0,137$ нм).

Расчеты показывают, что ионный радиус Cd больше шара, вписанного в центре куба. Поэтому можно предположить, что ион Cd , находясь в центре куба, подвергается сильному сжатию со стороны

редкоземельных ионов. Это может привести к сильной деформации приповерхностного слоя твердого раствора и стать причиной разрушения элементарных ячеек.

В ряду твердых растворов с увеличением t кадмий замещается на цинк. Ион Zn свободно размещается в центре куба, и такая ячейка должна быть устойчивой.

Вероятный механизм процесса может заключаться в следующем. Из-за указанной выше нестабильности элементарной ячейки с кадмием в центре в приповерхностном слое ионы редкоземельных элементов, соединяясь с кислородом, разрушают ячейку. При этом освободившиеся ионы Cd кристаллизуются, образуя на поверхности мозаичную структуру из маленьких монокристаллических блоков. Так как на дифрактограмме не появляются линии от окислов Gd и Y , то можно предположить, что они в аморфном состоянии размещаются в пространстве между кристалликами кадмия. С ростом толщины налета доступ кислорода к нижележащим слоям образца прекращается и процесс приостанавливается.

Эффективность задержки роста кристаллов Cd при покрытии поверхности вакуумной смазкой, по-видимому, связана с тем, что она по сравнению с другими примененными покрытиями лучше предотвращает доступ кислорода к поверхности образца.

Сравнение рефлексов от кристаллического кадмия, образовавшегося на поверхности твердого раствора, с рефлексами от массивного металлического кадмия показывает, что на дифрактограмме с образца твердого раствора уширений рефлексов, одной из причин которого могла быть малая величина кристалликов, не наблюдается. Это означает, что размеры блоков кристаллического кадмия не менее 100—150 нм.

Сравнением интенсивностей рефлексов кадмия от твердого раствора и массивного образца была оценена толщина образовавшегося слоя кадмия на образце $A1$. По нашим оценкам, она порядка 0,2 мкм.

Выделение кадмия на поверхности наблюдалось и в сплавах с другой химической формулой, например, в сплавах $GdCd$, $EuCd$. Обнаружено, что в ряду $GdCd$, YCd и $EuCd$, где происходит уменьшение параметра кристаллической решетки, наблюдается возрастание скорости образования кристаллического кадмия.

ЛИТЕРАТУРА

1. V. E. Adamian, A. A. Artsruni, A. Benaisa, A. N. Kocharian, M. A. Melikyan and A. G. Tonelian. Phys. Stat. Sol. (b), 156, 633 (1989).
2. В. Е. Адамян, А. А. Арцруни, А. Бенайсса, А. Н. Кочарян, М. А. Меликян. ФММ, № 5, 197, (1990).

**CsCl ՏԻՊԻ ԿԱՌՈՒՑՎԱԾՔ ՈՒՆԵՑՈՂ ՀԱԶՎԱԳՑՈՒՏ ՀՈՂԱՑԻՆ
ՄԵՏԱՂՆԵՐԻ ՀԵՏ ԿԱԴՄԻՈՒՄԻ ԵՎ ՑԻՆԿԻ ՀԱՄԱԶՈՒԼՎԱԾՔՆԵՐՈՒՄ
ԿԱԴՄԻՈՒՄԻ ՄԱԿԵՐԵՍԱՑԻՆ ԲՅՈՒՐԵՂԱՑՈՒՄԸ**

Վ. Ե. ԱԴԱՄՅԱՆ, Ա. Ա. ԱՐՏՐՈՒՆԻ, Է. Ս. ԱԲՈՎՅԱՆ, Մ. Ա. ՄԵԼԻԿՅԱՆ

Հայտնաբերված է բյուրեղային կադմիումի մակերևույթին շերտի առաջացումը $(Gd_{x_0}La_{1-x_0})Y_{(1-x_0)(1-l)}(Zn_1Cd_{1-l})$ պինդ լուծույթների համակարգի որոշ նմուշներում: Հետադոս-
ված է երևույթի կինետիկան, գնահատված է առաջացող շերտի հաստությունը: Դիտարկ-
վում է երևույթի հնարավոր մեխանիզմը:

**SPONTANEOUS SURFACE CRYSTALLIZATION OF CADMIUM IN
Cd AND Zn CONTAINING RARE-EARTH ALLOYS WITH CsCl-TYPE
STRUCTURE**

V. E. ADAMIAN, A. A. ARTSRUNI, E. S. ABOVIAN, M. A. MELIKIAN

Spontaneous formation of a crystalline cadmium on the surface layer of some solid solutions of $(Gd_{x_0}La_{1-x_0})Y_{(1-x_0)(1-l)}(Zn_1Cd_{1-l})$ was found. The kinetics of the process is studied, and the thickness of the formed layer is estimated. The possible mechanism of the phenomenon is considered.

АНАЛИЗ ВОЛЬТ-АМПЕРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК $Pb_{1-x}Sn_xTe<In>$ НА ОСНОВЕ МОДЕЛИ ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКИХ ЦЕНТРОВ

Ю. А. АБРАМЯН, К. З. ПАПАЗЯН, В. И. СТАФЕЕВ

Институт радиофизики и электроники НАН Армении

(Поступила в редакцию 21 марта 1992 г.)

На основе модели двухэлектронного захвата на ян-теллеровские центры (ЯТЦ) проведен анализ и качественный расчет вольт-амперных характеристик соединений $Pb_{1-x}Sn_xTe<In>$ при 4,2 К в условиях фоновой подсветки. Участок отрицательной дифференциальной проводимости на ВАХ представляется следствием гашения фоновой фотопроводимости посредством роста темпа захвата свободных электронов на ЯТЦ в сильных электрических полях. Выход ВАХ на плато объясняется компенсирующим действием ударной ионизации ЯТЦ на уменьшение времени жизни неравновесных носителей.

За последнее время в ряде работ [1—4] было обнаружено, что соединения $Pb_{1-x}Sn_xTe<In>$ в области температур $T \leq 20$ К имеют ряд уникальных свойств, таких, как долговременная релаксация неравновесных носителей, высокая фоточувствительность, оптическое гашение фотопроводимости, N -образность ВАХ и т. д.

Экспериментальные кривые ВАХ $Pb_{1-x}Sn_xTe<In>$ подробно рассмотрены в работе [4]. Было установлено, что в условиях фоновой подсветки до значений электрического поля $E \approx 7$ В · см⁻¹ ВАХ линейна, при $E = E_{\max} \approx 10$ В · см⁻¹ на ВАХ наблюдается максимум, при $E > E_{\max}$ ВАХ имеет участок отрицательной дифференциальной проводимости (ОДП), а выше некоторого $E_{\min} \approx 25 \div 30$ В · см⁻¹ ток почти не зависит от напряжения и ВАХ выходит на плато.

В данной работе проведен анализ этих особенностей ВАХ на основе модели двухэлектронного захвата на ЯТЦ.

Примесь индия при легировании $Pb_{1-x}Sn_xTe$ замещает вакансии металла и при $N_{In} \geq N_a$, N_a стабилизирует уровень Ферми, выявляя тем самым действие вакансий теллура. Вакансии теллура, согласно [5—7], выступают в роли глубоких центров, подверженных ян-теллеровской перестройке при изменении их зарядового состояния.

Свободным ЯТЦ высоко в зоне проводимости соответствует дублетный уровень. Захват электрона на этот уровень, благодаря сильному взаимодействию локализованного электрона с кристаллическим окружением, приводит к перестройке конфигурации окружающих центр атомов, которая сопровождается сдвигом вниз уровня E_1 центра с одним захваченным электроном. Захват второго электрона из-за еще более сильного взаимодействия с кристаллическим окружением приводит к еще большему сдвигу вниз относительно дна зоны проводимости уровня E_2 центра с двумя захваченными электронами. При этом между

свободным состоянием ЯТЦ, расположенном на высоте ε_0 от дна зоны проводимости, и локализованными состояниями E_1 и E_2 образуются потенциальные барьеры, приводящие к огромным значениям фотопроводимости, долговременной релаксации неравновесных носителей и т. д.

Энергетические положения индиевых и двухэлектронных состояний ЯТЦ близки и зависят от состава x и концентрации индия N_{In} . При $0,22 \leq x \leq 0,28$ как уровень индия ε_{In} [8], так и уровень E_2 [9] расположены в запрещенной зоне. В темноте все электроны находятся на состояниях ε_{In} и E_2 , и уровень Ферми стабилизирован на уровне индия ($\varepsilon_F \approx \varepsilon_{In}$), чем и объясняется высокоомное состояние материала.

При наличии фоновой подсветки часть электронов переходит из состояний E_2 в зону проводимости с перестройкой ЯТЦ в состояние E_1 , способное захватывать электроны из зоны проводимости. Созданные подсветкой фоном неравновесные носители из-за наличия барьера W_{01} между зоной проводимости и состоянием E_1 имеют большие времена жизни [10]

$$\tau_{n+} = \tau_{n0} \exp \frac{W_{01}}{kT}, \quad (1)$$

что приводит к их накоплению в зоне проводимости и смещению вверх уровня Ферми. При достаточно высоких уровнях фоновой подсветки уровень Ферми может оказаться в зоне проводимости (низкоомное состояние материала). Переходами с уровня индия и валентной зоны можно пренебречь из-за малых времён обратного захвата ($\sim 10^{-6}$ с).

В сильных электрических полях происходит разогрев электронного газа. Увеличение энергии свободных электронов равносильно уменьшению величины барьера W_{01} , что вызывает резкое уменьшение времени жизни неравновесных носителей из-за роста темпа захвата электронов на освободившиеся при подсветке фоном ЯТЦ. Таким образом, наличие участка ОДП на ВАХ представляется как гашение фоновой фотопроводимости приложенным электрическим полем.

Проведем качественный расчет ВАХ. Согласно [7], полная энергия состояния в модели ЯТЦ описывается соотношением

$$E_s(\Delta) = \frac{\Delta^2}{2\Delta_0} + v(\varepsilon_0 - \Delta) + (2-v)\varepsilon_F + U_v, \quad (2)$$

где $v=0,1,2$ —число электронов, захваченных на ЯТЦ, Δ —деформация решетки, Δ_0 —константа, характеризующая упругость решетки и величину электрон-фононной связи, U_v —энергия кулоновского отталкивания электронов, локализованных на ЯТЦ, уровень Ферми ε_F —граничная энергия электронов в зоне проводимости при наличии вырождения, которое возникает в результате перехода части электронов с ЯТЦ в зону проводимости при подсветке фоном.

В сильных электрических полях, когда энергия, приобретенная электроном в электрическом поле, $\varepsilon \gg kT$, полную энергию свободных электронов можно подставить в виде $\varepsilon_F + \varepsilon$. Тогда соотношение (2) будет иметь вид

$$F_v(\Delta) = \frac{\Delta^2}{2\Delta_0} + v(\varepsilon_0 - \Delta) + (2-v)(\varepsilon_F + \varepsilon) + U, \quad (3)$$

Отсюда нетрудно убедиться, что точке пересечения кривых $E_0(\Delta)$ и $E_1(\Delta)$ соответствует барьер

$$w_{01} = \frac{(\varepsilon_0 - \varepsilon_F - \varepsilon)^2}{2\Delta_0}. \quad (4)$$

между зоной проводимости и одноэлектронным состоянием ЯТЦ. С учетом (1) время жизни неравновесных носителей при этом равняется

$$\tau_{n+} = \tau_{n0} \exp \frac{(\varepsilon_0 - \varepsilon_F - \varepsilon)^2}{2\Delta_0 kT}. \quad (5)$$

ВАХ в присутствии фона определяется выражением

$$j = (\sigma_T + \delta\sigma)E, \quad (6)$$

где σ_T и $\delta\sigma$ — соответственно темновая и фоновая проводимость. Учитывая, что $\delta\sigma \gg \sigma_T$ [4], получим

$$j = \delta\sigma \cdot E. \quad (7)$$

Представим $\delta\sigma$ в её общепринятом виде

$$\delta\sigma = q\mu_n \beta n = q\mu_n \beta SN\Phi\tau_{n+}, \quad (8)$$

где Φ — число фотонов, падающих на единицу площади за секунду, β — число носителей, рожденных одним фотоном, S и N — соответственно сечение захвата фотона и концентрация ЯТЦ.

С учетом (5), (7) и (8) имеем

$$j = q\mu_n \beta SN\Phi\tau_{n0} \exp \left[\frac{(\varepsilon_0 - \varepsilon_F - \varepsilon)^2}{2\Delta_0 kT} \right] E, \quad (9)$$

где энергию ε , приобретенную электроном в электрическом поле E , представим в виде

$$\varepsilon = \frac{q^2 \tau^2}{m_{do}} E^2. \quad (10)$$

При этом уравнение (9) запишется как

$$j = q\mu_n \beta SN\Phi\tau_{n0} \exp \left[\frac{\left(\varepsilon_0 - \varepsilon_F - \frac{q^2 \tau^2}{m_{do}} E^2 \right)^2}{2\Delta_0 kT} \right] E. \quad (11)$$

В данных условиях ($T = 4,2$ К, линейность ВАХ до точки срыва) преобладающим механизмом рассеяния является рассеяние на внутренней части потенциала иона примеси [11], при котором μ_n , τ , S и τ_{n0}

являются слабыми функциями E . Приравняв к нулю дифференциал по E выражения (11), получим значения поля

$$E_{\max} = \left\{ \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_F}{2} \cdot \frac{m_{d0}}{q^2} \left[1 - \left(1 - \frac{2\Delta_0 kT}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_F)^2} \right)^{1/2} \right] \right\}^{1/2}, \quad (12)$$

при котором на ВАХ наблюдается максимум.

Проведем численные оценки. Подставив в (12) значения $\varepsilon_F \approx 5$ мэВ (при $\delta n \approx 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$), $m_{d0} \approx 0,07 m_0$, $\mu_n \approx 10^5 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$, $\tau = \mu_n m_{d0} / jq \approx 8 \cdot 10^{-12} \text{ с}$ и значения ε_0 и Δ_0 , которые, согласно [9], изменяются в пределах $\varepsilon_0 \approx 175 \div 125,5$ мэВ и $\Delta_0 \approx 177 \div 151$ мэВ при изменении состава x от 0,22 до 0,26, получим, что $E_{\max} \approx 10 \text{ В} \cdot \text{см}^{-1}$, и это значение слабо зависит от ε_0 и Δ_0 , т. е. от x и N_{In} . Данные оценки находятся в полном соответствии с экспериментальными данными [4].

Если бы при $E > E_{\max}$ механизм рассеяния оставался прежним, то согласно (11), после переключения значение поля $E_{\min}$, при котором ВАХ имеет минимум, должно было равняться $E_{\min} \approx [(\varepsilon_0 - \varepsilon_F) m_{d0}]^{1/2} / q \tau \approx 200 \div 300 \text{ В} \cdot \text{см}^{-1}$ при изменении состава в пределах $x = 0,22 \div 0,26$. В то время как экспериментальные значения $E_{\min} \approx 25 \div 30 \text{ В} \cdot \text{см}^{-1}$ и при $E > E_{\min}$ ВАХ выходит на плато [4]. Такое несоответствие можно объяснить, если принять, что при $E > E_{\max}$ происходит смена механизма рассеяния, при котором подвижность сильно увеличивается с ростом поля. Однако оценки показывают, что полного соответствия с экспериментальными результатами можно достичь, если принять, что при $E > E_{\max}$ имеет место сильный рост концентрации с полем, который можно связать либо с нагревом образца, либо же с ударной ионизацией.

Согласно [1], в области $T \leq 20 \text{ К}$ при изменении температуры проводимость не меняется, поэтому предпочтительнее считать, что при $E > E_{\max}$, начиная с некоторых значений приложенного поля, имеет место ударная ионизация ян-теллеровских центров при преимущественном рассеянии электронов полярными оптическими фононами.

ВАХ при этом будет выражаться соотношением

$$j = q n_1(E) [\delta n + \delta n_1] E, \quad (13)$$

где δn_1 — концентрация носителей, появившихся при ударной ионизации:

$$\delta n + \delta n_1 = \delta n \cdot M(E), \quad (14)$$

$M(E)$ — коэффициент умножения [12]:

$$M = \left\{ 1 - \int_0^j \alpha[E(y)] dy \right\}^{-1}, \quad (15)$$

$$\alpha \sim \exp\left(-\frac{\varepsilon_i A}{E^2}\right).$$

Здесь $\alpha(E)$ — коэффициент ударной ионизации, ε_i — энергия ионизации.

Тогда, учитывая (8) и (9), из (13) и (14) можно написать

$$j = q^2 S N \Phi \tau_{no+1}^{1/2}(E) M(E) \exp \left[\frac{(\varepsilon_0 - \varepsilon_F - \varepsilon(E))^2}{2 \Delta_0 k T} \right] E. \quad (16)$$

Как видно из (16), быстрый рост с полем подвижности электронов и коэффициента умножения может, начиная с некоторого $E \geq E_{\min}$, компенсировать уменьшение времени жизни, в результате чего ВАХ выйдет на плато.

Таким образом, величины $E_{\max}$ и $E_{\min}$, а также значения токов в максимуме и на плато зависят от состава x , уровня освещения и исходной проводимости, определяемой содержанием индия. Поэтому сравнивать эти параметры для одного и того же состава следует при одинаковых уровнях освещения и N_{In} .

ЛИТЕРАТУРА

1. В. С. Виноградов и др. Письма в ЖЭТФ, 32, '22 (1980).
2. В. И. Кайданов, Ю. И. Равич. УФН, 145, 51 (1985).
3. Б. А. Акимов и др. ФТП, 22, 248 (1988).
4. Ю. А. Абрамян, К. З. Папазян, В. И. Стафеев. ФТП, 24, 1752 (1990).
5. Б. А. Волков, О. А. Панкратов. ДАН СССР, 255, 93 (1980).
6. Б. А. Волков, О. А. Панкратов. ЖЭТФ, 88, 280 (1985).
7. И. И. Засавицкий и др. Письма в ЖЭТФ, 42, 3 (1985).
8. Ю. А. Абрамян, К. З. Папазян, В. И. Стафеев. ФТП, 26, 157 (1992).
9. И. И. Засавицкий, Б. Н. Мацонашвили, В. Т. Трофимов. ФТП, 23, 2019 (1989).
10. И. И. Засавицкий, К. Лишка, Х. Хайрих. ФТП, 19, 1058 (1985).
11. С. Г. Гусан-Заде и др. ФТП, 9, 380 (1975).
12. А. С. Тагер, В. М. Вальд-Перлов. Лавинно-пролетные диоды и их применение в технике СВЧ. М., Сов. радио, 1968.

ANALYSIS OF CURRENT-VOLTAGE CHARACTERISTICS FOR $Pb_{1-x}Sn_xTe<In>$ COMPOUNDS BASED ON THE MODEL OF YAHN-TELLER CENTERS

YU. A. ABRAHAMIAN, K. Z. PAPAZIAN, V. I. STAFEEV

On the basis of two-electron capturing model by Yahn-Teller centers (YTC), current-voltage characteristics of $Pb_{1-x}Sn_xTe<In>$ compounds were analyzed and calculated at 4,2K in the presence of background illumination. Negative differential conductivity branch of CV-characteristics seems to result from the extinction of background photo-conductivity due to increase of free-electron capturing rate by YTC in the high-intensity electrical fields. The plateau part of CV-characteristics is explained by the compensational effect of YTC impact ionization on the life reduction of non-equilibrium carriers.

УШИРЕНИЕ ЛИНИИ ЭПР ИОНА Ni^{2+}
В МОНОКРИСТАЛЛАХ $\alpha-LiIO_3$

А. А. МИРЗАХАНИЯН, Г. Р. АСАТРЯН

Институт физических исследований НАН Армении

(Поступила в редакцию 30 июня 1993 г.)

В широком интервале частот измерена температурная зависимость ширины линий ЭПР примесного иона Ni^{2+} в монокристаллах йодата лития. Показано, что в $\alpha-LiIO_3$ кроме обычных механизмов уширения, существенную роль играет вклад в ширину, обусловленный температурными изменениями колебаний дефектов вблизи примесного иона.

Спектр ЭПР примесных ионов никеля в монокристаллах гексагональной модификации йодата лития ($\alpha-LiIO_3$) исследовался в [1, 2]. Было установлено, что ионы Ni^{2+} (конфигурация $3d^8$, $S=1$) замещают ионы лития в октаэдрической кислородной координации, причем наличие в потенциале кристаллического поля сильной тригональной компоненты приводит к большому начальному расщеплению между синглетом $|0\rangle$ и дублетом $|\pm 1\rangle$ (аксиальный параметр спинового гамильтониана $|D| \sim 100$ ГГц). В настоящей работе приводятся результаты подробного исследования ширины линий ЭПР иона Ni^{2+} в $\alpha-LiIO_3$ в широком интервале температур и частот.

Измерения проводились в интервале $4 \div 350$ К на ЭПР-спектрометре X-диапазона, а также на перестраиваемом спектрометре миллиметрового диапазона [3] на частотах $50 \div 140$ ГГц, что позволило регистрировать как внутридублетный переход $-1 \rightarrow +1$, так и переходы $0 \rightarrow \pm 1$. Концентрация ионов никеля в образцах составляла $\sim 0,1$ ат.%. Как и следовало ожидать, вследствие большой величины начального расщепления в X-диапазоне у перехода $-1 \rightarrow +1$ наблюдается сильная угловая зависимость резонансных полей, которая хорошо совпадает с рассчитанной при значениях $g_{||}=2,280$, $g_{\perp}=2,257$. В отличие от g -факторов аксиальный параметр D существенно зависит от температуры и при 300 К равен $-96,3$ ГГц (знак D определен по интенсивности ЭПР-переходов при гелиевых температурах).

При измерении ширины линий переходов $0 \rightarrow \pm 1$ на высоких частотах было обнаружено, что при $\theta=0^\circ$ ΔB не зависит от частоты и величины резонансного поля, однако в зависимости от качества кристаллов меняется в 1,5—2 раза. Для двух исследованных образцов с одинаковой концентрацией ионов никеля температурная зависимость ширины линий представлена на рисунке. Следует отметить, что ширина перехода $-1 \rightarrow +1$ гораздо меньше, причем она практически не зависит ни от температуры, ни от качества кристаллов. Эту разницу можно объяс-

нить, если учесть, что в ширину переходов $0 \rightarrow \pm 1$ основной вклад дает локальная неоднородность кристаллического поля, приводящая к

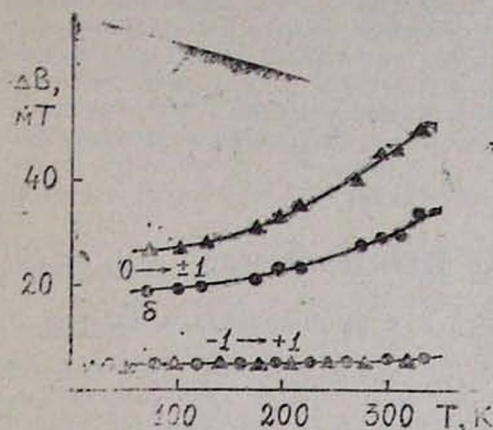


Рис. 1. Температурная зависимость ширины линий ЭПР иона Ni^{2+} в $\alpha-LiIO_3$ при $\theta = 0^\circ$ для двух образцов: а (Δ) и б ($\bullet$). Измерения сделаны на частотах 9,37 ГГц (переход $-1 \rightarrow +1$), 91,2 ГГц и 100,8 ГГц (переходы $0 \rightarrow \pm 1$).

разбросу аксиального параметра. Из расчетов следует, что для исследованных образцов при 77 К $\Delta D/D \approx 5 \cdot 10^{-3}$. Как известно, на ширину перехода $-1 \rightarrow +1$ вблизи $\theta = 0^\circ$ этот разброс в первом порядке не влияет [4]. Отметим, что возможность регистрации этой «запрещенной» линии и ее асимметричную форму (более широкое крыло со стороны малых полей) удастся объяснить при учете разброса ромбического параметра E вокруг нулевого значения: $\sqrt{(\Delta E)^2} \approx 0,3$ ГГц. Эта величина сравнима со средним разбросом аксиального параметра D и свидетельствует о случайном распределении дефектов вблизи примесных ионов.

Из рисунка также видно, что выше 100 К наблюдается значительное уширение переходов $0 \rightarrow \pm 1$, причем температурные изменения ΔB пропорциональны начальной ширине при низких температурах. Очевидно, что такое поведение обусловлено не обычными процессами спин-решеточной релаксации, а температурными флуктуациями начального расщепления из-за колебаний дефектов вблизи ионов Ni^{2+} . Подобное уширение было обнаружено ранее и на междублетных переходах иона Mo^{3+} в монокристаллах корунда [5], и, по-видимому, оно характерно для тех ионов, которые вследствие сильного взаимодействия с кристаллической решеткой чувствительны к дефектам ближайшего окружения. На наш взгляд, в $\alpha-LiIO_3$ данное уширение усиливается из-за большой величины диэлектрической проницаемости и близости температуры структурного фазового перехода ($T_c = 510$ К) [6].

ЛИТЕРАТУРА

1. А. А. Мирзаханян. ФТТ, 23, №8, 2452 (1981).
2. М. Л. Мейльман, В. Ф. Карягин, О. В. Мартиросян. ФТТ, 24, № 10, 3154 (1982).
3. К. Н. Кочарян, А. А. Мирзаханян. Изв. АН АрмССР, Физика, 11, № 6, 484 (1976).
4. А. Абрагам, Б. Блун. Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов, т. 1, М., Мир, 1972.
5. А. А. Мирзаханян, К. Н. Кочарян. ФТТ, 23, № 1, 90 (1981).
6. Подат лития. Выращивание кристаллов, их свойства и применение. Новосибирск, Наука, 1980.

Ni^{2+} իոնի էՊՌ ԳԾԵՐԻ ԼԱՅՆԱՑՈՒՄԸ $\alpha-LiIO_3$ ՄԻԱՐՅՈՒՐԵՂՆԵՐՈՒՄ

Ա. Ա. ՄԻՐԶԱԽԱՆՅԱՆ, Հ. Ռ. ԱՍԱՏՐՅԱՆ

Հաճախությունների լայն տիրույթում չափված է Ni^{2+} իոնի էՊՌ գծերի լայնության ջերմաստիճանային կախումը: Ցույց է տրված, որ $\alpha-LiIO_3$ -ում գծերի լայնացման մեջ կարևոր դեր է խաղում այն ներդրումը, որը պայմանավորված է խառնուրդային իոնի մոտակայքում դեֆեկտների տատանումների ջերմաստիճանային փոփոխություններով:

WIDENING OF ESR LINES OF Ni^{2+} ION IN $\alpha-LiIO_3$ SINGLE CRYSTALS

A. A. MIRZAKHANYAN, H. R. ASATRYAN

In the large frequency range the temperature dependencies of ESR linewidths of Ni^{2+} impurity ions in $\alpha-LiIO_3$ single crystals have been measured. It has been shown that in $\alpha-LiIO_3$ an important contribution to the linewidth exists, which is caused by temperature alterations of defects fluctuations near the impurity ion.

Ա. Ա. Ասատրյան, Է. Ու. Ա. Կրավցով. Մասշտաբի մեթոդի կիրառության սահմանները	51
Ն. Ն. Դորխմազյան, Գ. Գ. Մելիքյան. Իոնային բյուրեղներում խողակավորման էֆեկտի պոտենցիալների տեսական հետազոտումը	56
Ա. Գ. Իսախանյան, Մ. Լ. Տեր-Միքայելյան, Բ. Գ. Շերման. Բնակեցվածության տատանումների կոլապսի ու վերածննդի բաղադրարարները էֆեկտները ուղղահայան սեղմված լույսի դաշտում	69
Ա. Ռ. Մկրտչյան, Ս. Ռ. Ներսիսյան, Ն. Վ. Թաթևյան. Աղետներ խոլեստերիկ հեղուկ բյուրեղի պատողական բնորոշակության շերտային փոփոխության ժամանակ	76
Մ. Վ. Սիմոնյան, Է. Գ. Շառոյան. Կապարի ֆտալոցիանինի մոնոկլինային և տրիկլինային մոդիֆիկացիաների անցումը	81
Վ. Ն. Աղամյան, Ա. Ա. Արծրունի, Է. Ս. Աբովյան, Մ. Ա. Մելիքյան. $CsCl$ տիպի կառուցվածք ունեցող հալվազային հողային մետաղների հետ կազմումի և ցինկի համաձուլվածքներում կազմի մակերևույթի բյուրեղացումը	88
Յու. Ա. Աբրահամյան, Կ. Զ. Փափազյան, Վ. Ի. Ստաֆեև. $Pb_{1-x}Sn_xTe<In>$ միացությունների վոլտ-ամպերային բնութագրերի վերլուծությունը լան-թեյլերյան կենտրոնների մոդելի հիման վրա	95
Ա. Ա. Միրզախանյան, Հ. Ռ. Ասատրյան. Ni^{2+} իոնի էՊՌ գծերի լայնացումը $\alpha-LiIO_2$ միաբյուրեղներում	100

CONTENTS

A. A. Asatryan, Yu. A. Kravtsov. Limits of applicability of Maslovs method.	51
N. N. Corkhmazian, G. G. Melikian. The theoretical investigation of effective potentials of channeling in ionic crystals	56
A. D. Gazazyan, M. L. Mikaelyan, B. G. Sherman. The effects of collapse and revival of population oscillations in resonant squeezed light.	69
A. R. Mkrtchyan, S. R. Nersisyan, N. V. Tabiryan. Catastrophes take place by a thermal change of the rotational ability of the cholesteric liquid crystal	76
M. V. Simonyan, E. G. Sharoyan. Crystal growth of monoclinic and triclinic modifications of lead phthalocyanine	81
V. E. Adamian, A. A. Artsruni, E. S. Abovian, M. A. Melikian. Spontaneous surface crystallization of cadmium in Cd and Zn containing rare-earth alloys with $CsCl$ -type structure	88
Yu. A. Abrahamian, K. Z. Papazian, V. I. Stafeyev. Analysis of current-voltage characteristics for $Pb_{1-x}Sn_xTe<In>$ compounds based on the model of Yahn-Teller centers	95
A. A. Mirzakhanyan, H. R. Asatryan. Widening of ESR lines of Ni^{2+} ion in $\alpha-LiIO_2$ single crystals	100

СОДЕРЖАНИЕ

А. А. Асатрян, Ю. А. Кравцов. О пределах применимости метода Маслова	51
Н. Н. Корхмазян, Г. Г. Меликян. Теоретическое исследование эффективных потенциалов каналирования в ионных кристаллах	56
А. Д. Газазян, М. Л. Тер-Микаелян, Б. Г. Шерман. Квантовые эффекты коллапса и возрождения осцилляций населенности в резонансном сжатом свете	69
А. Р. Мкртчян, С. Р. Нерсисян, Н. В. Табириян. Катастрофы при тепловом изменении вращательной способности холестерического жидкого кристалла	76
М. В. Симонян, Э. Г. Шароян. Выращивание монокристаллов фталоцианина свинца моноклинной и триклинной модификаций	81
В. Е. Адамян, А. А. Арируни, Э. С. Абовян, М. А. Меликян. Спонтанная поверхностная кристаллизация кадмия в сплавах редкоземельных металлов с Cd и Zn со структурой $CsCl$	88
Ю. А. Абрамян, К. З. Папазян, В. И. Стафеев. Анализ вольт-амперных характеристик $Pb_{1-x}Sn_xTe<In>$ на основе модели ян-теллеровских центров	95
А. А. Мирзаханян, Г. Р. Асатрян. Уширение линий ЭПР иона Ni^{2+} в монокристаллах $\alpha-LiIO_3$	100