

ՓԻԶԻԿԱ · ՖԻԶԻԿԱ · PHYSICS



ИЗВЕСТИЯ
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК АРМЕНИИ

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ
ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ

PROCEEDINGS
OF NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF ARMENIA

Журнал издается с 1966 г.
Выходит 6 раз в год
на русском 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 ԿՈՒԵԳԻԱ

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

EDITORIAL BOARD

VI. 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. Mkrthchyan
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.

КВАНТОВОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ СКАЛЯРНЫХ ЧАСТИЦ
ДВИЖУЩИМИСЯ ЗЕРКАЛАМИ. II.

Л. Ш. ГРИГОРЯН, А. А. СААРЯН

Институт прикладных проблем физики НАН Армении

(Поступила в редакцию 26 ноября 1996 г.)

Рассмотрены приложения выведенной в первой части работы общей формулы для числа квантов скалярного поля, излученных ускоренно движущимися зеркалами. Исследованы различные случаи колебаний плоского зеркала, включая случай акустических волн, возбужденных на поверхности зеркала.

1. *Введение.* Взаимодействие вакуумных флуктуаций квантованного поля с ускоренно движущимися зеркалами приводит к излучению квантов этого поля [1,2]. В первой части [3] данной работы исследовалось квантовое излучение скалярных частиц зеркалами, медленно движущимися в пространстве-времени Минковского. Методом теории возмущений рассчитаны коэффициенты преобразования Боголюбова, связывающие начальное (in) и конечное (out) состояния вакуума (соответственно до начала и после завершения движения зеркала) массивного скалярного поля. С их помощью можно рассчитать спектральное распределение числа излученных квантов при произвольном достаточно медленном колебании зеркала.

Здесь мы рассмотрим некоторые приложения этих результатов. В п.2 исследован наиболее простой случай двумерного пространства-времени. Подробно рассмотрены гармонические колебания зеркала. Рассчитаны спектральная плотность числа квантов и полная энергия излучения. Более реалистичский случай четырехмерного пространства-времени исследован в п.3. Рассмотрены случаи как бегущей, так и стоячей поверхностных волн, возбужденных на плоской поверхности зеркала. Выводы представлены в п.4.

2. *Излучение в двумерном пространстве-времени.* Пусть $\phi(x)$ — скалярное поле, удовлетворяющее граничному условию Дирихле на гиперповерхности S движущегося зеркала. Если S мало отличается (в смысле, указанном в [3]) от статической гиперповерхности S_0 , то для числа частиц $n(\nu)d\nu$, излученных в интервале квантовых чисел $\nu, \nu+d\nu$ в первом неисчезающем приближении по отклонению $\xi' = n'\xi$ гиперповерхности S от S_0 справедлива формула [3]

$$n(\nu) = \int |\beta_{\nu'}|^2 d\nu', \quad (1)$$

$$\beta_{\nu'} = i \int_{S_0} n' n^* [\partial'_i \varphi_{\text{out}}(x')] [\partial'_k \varphi_{\text{in}}(x')] \xi(x') d\Sigma',$$

где $\beta_{\nu'}$ — коэффициенты Боголюбова, n^i — нормаль к гиперповерхности S_0 , $\varphi_{0\nu}$ — собственные функции соответствующей граничной задачи (задача Дирихле) для гиперповерхности S_0 .

Для двумерного пространства-времени (гиперповерхность S_0 — прямая $x=0$)

$$\varphi_{0\nu} = \varphi_{0k} = -\frac{i}{\sqrt{\pi\omega}} \sin kxe^{-i\omega t}, \quad \omega = \sqrt{k^2 + m^2}, \quad (2)$$

где m — масса квантов скалярного поля, и поэтому согласно (1)

$$\rho_{kk'} = -\frac{ikk'}{\pi\sqrt{\omega\omega'}} \xi(\omega + \omega'), \quad \xi(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \xi(t) e^{-i\omega t} dt \quad (3)$$

(для определенности в качестве области квантования выбрано полупространство $x > 0$). Формула (3) в случае $m=0$ в первом приближении по ξ' совпадает с точной формулой, выведенной в [4] для случая безмассового поля $\varphi(x)$. Из (1) с учетом формулы (3) для плотности распределения числа частиц по модам k получим

$$n(k) = \frac{k^2}{\pi^2\omega} \int_0^\infty \frac{k'^2}{\omega'} |\xi(\omega + \omega')|^2 dk', \quad (4)$$

где частота ω и волновое число k связаны соотношением (2).

В случае гармонических колебаний $\xi(t) = \xi_0 \cos \omega_0 t$ число квантов, излученных в единицу времени в область $x > 0$, определяется выражением

$$n(k) = \frac{\xi_0^2 k^2}{2\pi\omega} \sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 - m^2}, \quad m \leq \omega \leq \omega_0 - m. \quad (5)$$

Отсюда в качестве необходимого условия наличия излучения имеем $\omega_0 > 2m$, причем максимальная частота излученных квантов равна $\omega_0 - m$. Энергия, излученная в единицу времени, вычисленная с помощью числа квантов (5), равна

$$E = \int_0^\infty \omega n(k) dk = \frac{\xi_0^2 \omega_0^4}{24\pi} f\left(\frac{m}{\omega_0}\right), \quad (6)$$

$$f(x) = 12 \int_x^{1/2} \sqrt{y^2 - x^2} \sqrt{(1-y)^2 - x^2} dy, \quad 0 \leq x \leq 1/2.$$

График функции $f(x)$ приведен на рис. 1, откуда видно, что максимальная энергия излучения соответствует безмассовому случаю. Формулы (5), (6) справедливы при условии $d\xi/dt \sim \xi_0 \omega_0 \ll 1$ (см. [3]). С учетом $\omega_0 > 2m$ это приводит к ограничению $\xi_0 \ll m^{-1}$ на амплитуду колебаний зеркала. Отсюда следует, что рассмотренный общий случай

массивного поля представляет лишь академический интерес, и с практической точки зрения наиболее важен случай безмассового поля. В этом пределе соответствующие формулы получаются из (5), (6) предельным переходом $m \rightarrow 0$ ($\hbar$ и c восстановлены):

$$n(\omega) = \frac{\xi_0^2}{2\pi c^2} \omega(\omega_0 - \omega), \quad \omega \leq \omega_0, \quad E = \frac{\hbar \xi_0^2 \omega_0^4}{24\pi c^2}. \quad (7)$$

Постоянная Планка в формуле для энергии указывает на квантовый характер процесса излучения.

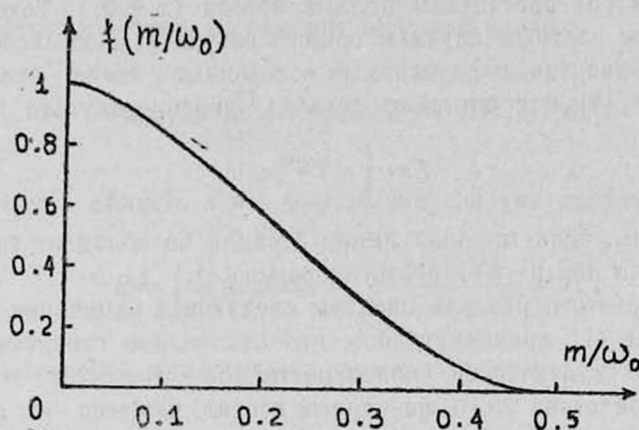


Рис. 1. Зависимость $f = E(m)/E(0)$ (см. формулу (6)) от m/ω_0 , где $E(m)$ — энергия излучения скалярных частиц массы m гармонически колеблющимся зеркалом в двумерном пространстве-времени.

В случае безмассового поля можно получить простую формулу для мощности излучения при произвольном движении зеркала. Действительно, с учетом формулы (4) при $m=0$ энергию, излученную в единицу времени (в области $x > 0$) можно представить в виде

$$E = \int \omega n(\omega) d\omega = \frac{2i}{\pi^2} \int_{-\epsilon}^{+\infty} \frac{\xi(t)\xi(t')}{(t-t'+i\epsilon)^3} dt dt', \quad \epsilon > 0. \quad (8)$$

Перейдя к новым переменным $t_1 = t' - t$, $t_2 = t' + t$, интеграл по t_1 можно преобразовать следующим образом:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(t_1)}{(t_1 - i\epsilon)^3} dt_1 = \text{p.v.} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(t_1)}{t_1^3} dt_1 + \int_{\epsilon}^{\infty} \frac{f(t_1)}{t_1^3} dt_1 = \frac{i\pi}{4!} f^{(4)}(0), \quad (9)$$

где

$$f(t_1) = \xi\left(\frac{t_2 + t_1}{2}\right) \dot{\xi}\left(\frac{t_2 - t_1}{2}\right), \quad (10)$$

а C —малая полуокружность в комплексной плоскости t_1 , обходящая точку $t_1=0$ снизу. С учетом (9) и условий $\xi(t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \pm\infty$, после интегрирования по частям получим

$$E = \frac{1}{12\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} |\dot{\xi}''(t)|^2 dt. \quad (11)$$

Этот результат совпадает с аналогичной формулой, выведенной в [5] с помощью тензора энергии-импульса (различие в коэффициентах обусловлено тем, что мы рассматриваем излучение в область $x > 0$, тогда как в [5] рассчитаны полные потери ($x \geq 0$)). Такое совпадение является частным случаем общего результата, согласно которому в двумерной энергии, определяемые с помощью числа квантов $n(\omega)$ по формуле (8) и с помощью тензора энергии-импульса по формуле

$$E = \int \langle T^{00} \rangle dV, \quad (12)$$

эквивалентны, если мировая линия зеркала не обладает так называемыми $u=t-x$ или $v=t+x$ асимптотиками [4].

В конце этого раздела сделаем следующее замечание. При выводе формулы (1) предполагалось, что отклонение гиперповерхности S зеркала от статической поверхности S_0 стремится к нулю при $t \rightarrow \pm\infty$. Вследствие этого, на первый взгляд, кажется, что она не применима к рассмотренному выше случаю гармонических колебаний. Однако мы могли бы поступить следующим образом. Вместо строго гармонической функции можно было выбрать $\xi(t) = \xi_0 \cos \omega_0 t \cdot F(a, t)$, где F —обрезающая функция ($F(0, t) = 1$, a —параметр), удовлетворяющая указанному выше условию: $F(a, t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \pm\infty$. Произведя необходимые вычисления, например, с $F(a, t) = e^{-a|t|}$ (в действительности в пределе $a \rightarrow 0$ результат не должен зависеть от вида этой функции), и переходя в конечных формулах к пределу $a \rightarrow 0$, мы снова придем к формулам (5—7) для числа излученных в единицу времени квантов и энергии излучения. Таким образом, предложенная схема вычислений применима к гармоническим колебаниям, если предполагать, что они асимптотически выключаются в бесконечно прошлом (*in*-область) и в бесконечно будущем (*out*-область).

3. *Четырехмерный случай.* Рассмотрим квантовое излучение скалярных частиц в четырехмерном пространстве-времени при малых колебаниях плоского зеркала (плоскость $x=0$). Аналогично двумерному случаю квантованное поле рассматривается в полупространстве $x > 0$. Невозмущенные собственные функции

$$\varphi_{\alpha\omega} = \varphi_{0k} = \frac{\sin k_1 x}{2i\pi \sqrt{\pi\omega}} e^{ik_1 x - i\omega t}, \quad \omega = \sqrt{k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 + m^2}, \quad (13)$$

где $x_\perp = (y, z)$ —координаты в плоскости зеркала. Из (1) для числа частиц моды k получим

$$n(k) = \frac{1}{16\pi^6} \int \frac{k_1^2 k_1'^2}{\omega \omega'} |\xi(\omega + \omega', k_{\perp} + k_{\perp}')|^2 dk', \quad (14)$$

$$\xi(\omega, k_{\perp}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \xi(t, y, z) e^{ik_{\perp} x} e^{-i\omega t} dt dy dz.$$

Рассмотрим несколько приложений этой формулы в случае $m=0$. Пусть сначала плоскость колеблется как целое: $\xi = \xi(t)$ и

$$\xi(\omega, k_{\perp}) = 4\pi^2 \xi(\omega) \delta(k_{\perp}). \quad (15)$$

Число частиц в расчете на единицу площади равно

$$n(k) = \frac{k_1^2}{4\pi^4 \omega} \int_{k_{\perp}}^{\infty} |\xi(\omega + \omega')|^2 \sqrt{\omega'^2 - k_{\perp}^2} d\omega'. \quad (16)$$

Излученная в область $x > 0$ полная энергия (на единицу площади)

$$E = \int \omega n(k) dk = \frac{1}{i\pi^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\xi(t) \xi(t')}{(t - t' + i\epsilon)^2} dt dt'. \quad (17)$$

После вычислений, аналогичных двумерному случаю, получим

$$E = \frac{1}{720\pi^3} \int_{-\infty}^{+\infty} |\xi'''(t)|^2 dt. \quad (18)$$

С учетом вклада излучения в области $x < 0$ эта формула совпадает с результатом работы [5], полученным с помощью тензора энергии-импульса.

Перейдем к случаю бегущей поверхностной волны (например, акустической)

$$\xi(t, y, z) = f(z - v_0 t), \quad (19)$$

возбужденной на поверхности плоского зеркала и распространяющейся по направлению оси z со скоростью v_0 . При этом фурье-образ смещения

$$\xi(\omega, k_{\perp}) = \frac{2\pi^2}{v_0} \delta(k_z) \delta\left(k_z - \frac{\omega}{v_0}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} f(z) e^{i(k_z + \omega/v_0)z/2} dz. \quad (20)$$

Он равен нулю при $v_0 < 1$, так как $k_z \leq \omega$. В этом случае кванты не излучаются, что становится очевидным, если перейти в систему отсчета, которая движется вместе с волной. В случае гармонических колебаний

$$\xi = \xi_0 \cos(k_0 z - \omega_0 t) \quad (21)$$

с $\omega_0 > k_0$ излучаются кванты, удовлетворяющие условию

$$\omega_0 - \omega \geq \sqrt{k_2^2 + (k_0 - k_3)^2}. \quad (22)$$

Число таких квантов, излученных в единицу времени с единицы площади зеркала, определяется формулой

$$n(k) = \frac{k_1^2 \xi_0^2}{8\pi^3 \omega} \sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 - k_2^2 - (k_0 - k_3)^2}. \quad (23)$$

Ее предел при $k_0 \rightarrow 0$ соответствует плоскости, колеблющейся как целое. В этом случае формула для числа квантов в интервале частот $\omega, \omega + d\omega$, излученных в телесный угол $d\Omega$, в единицу времени и с единицы поверхности имеет вид

$$n(k) \omega^2 d\omega d\Omega = \frac{\xi_0^2}{8\pi^3} \cos^2 \theta (\omega_0^2 - 2\omega_0 \omega + \omega^2 \cos^2 \theta)^{1/2} d\omega d\Omega, \quad (24)$$

$$\omega_0 - \omega \geq \omega |\sin \theta|, \quad -\pi/2 \leq \theta \leq \pi/2,$$

где θ — угол между нормалью поверхности зеркала и направлением излучения. Спектральная плотность числа квантов получается отсюда интегрированием по телесному углу:

$$n(\omega) = \frac{\xi_0^2 \omega_0^4}{32\pi^3} \left[u(1-u)^3 + u^3(1-u) + \frac{1}{2} (1-2u)^2 \ln|1-2u| \right], \quad u \equiv \omega/\omega_0. \quad (25)$$

Полное число N квантов и энергия E , излученные в единицу времени с единицы поверхности зеркала, имеют вид ($\hbar$ и c восстановлены)

$$N = \frac{\xi_0^2 \omega_0^5}{720\pi^3 c^4}, \quad E = \frac{\hbar \xi_0^2 \omega_0^6}{1440\pi^3 c^4}. \quad (26)$$

Эти формулы являются четырехмерными аналогами (7). Формулу для энергии (26) можно получить также непосредственно из (18) подстановкой $\xi(t) = \xi_0 \cos \omega_0 t$, полагая, что возмущение асимптотически выключается в областях $t \rightarrow \pm \infty$.

В заключение рассмотрим случай стоячей акустической волны, возбужденной на поверхности плоского зеркала в полосе $0 \leq z \leq L$, $-\infty < y < \infty$:

$$\xi = \xi_0 \cos \omega_0 t \sin k_0 z, \quad k_0 = \pi n / L, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (27)$$

при $0 \leq z \leq L$, и $\xi = 0$ в противном случае. Подставляя фурье-образ

$$\xi(\omega, \mathbf{k}_\perp) = 2\pi^2 \xi_0 \delta(\omega - \omega_0) \delta(k_2) \frac{1 - (-1)^n e^{ik_3 L}}{k_0 - k_3^2 / k_0}, \quad (28)$$

из (14) можно вывести следующую формулу:

$$n(k) = \frac{k_1^2 \xi_0^2}{8\pi^4 \omega} \int_{u_1}^{u_2} [1 - (-1)^n \cos \pi n u] \sqrt{(u - u_1)(u_2 - u)} \frac{du}{(1 - u^2)^2} \quad (29)$$

для числа квантов моды k , излученных в единицу времени и в расчете на единицу длины в направлении оси y ,

$$k_0 u_{2,1} = k_3 \pm \sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 - k_2^2}. \quad (30)$$

При этом должны выполняться условия

$$\omega = \sqrt{k_1^2 + k_2^2 + k_3^2} \leq \omega_0, \quad |k_3| \leq \omega_0 - \omega. \quad (31)$$

Заметим также, что $n(k_1, k_2, -k_3) = n(k_1, k_2, k_3)$, как и следовало ожидать из симметрии задачи.

Разумеется, сделанное в конце предыдущего раздела замечание о применимости формулы (1) к гармоническим колебаниям поверхности зеркала, остается в силе и в четырехмерном случае.

4. *Выводы.* Исследовано квантовое излучение скалярных частиц зеркалами, медленно движущимися в пространстве-времени Минковского. Методом теории возмущений рассчитаны коэффициенты преобразования Боголюбова (см. формулу (19) в [3]), связывающие начальное (in) и конечное (out) состояния вакуума массивного скалярного поля (соответственно до начала и после завершения движения зеркал). С их помощью можно рассчитать спектральное распределение числа излученных квантов при произвольном достаточно медленном колебании зеркал.

В случае двумерного пространства-времени вычислено число квантов, излученных скалярным полем (формула (5)), и рассчитана полная энергия излученных квантов. В частном случае безмассового поля формула (11) для полной энергии совпадает с результатом работы [5], рассчитанным путем перенормировки тензора энергии-импульса скалярного поля. Такое совпадение не тривиально и не всегда имеет место [4].

Для четырехмерного пространства-времени рассмотрен случай (а) плоского зеркала, колеблющегося как целое, а также случай (б) бегущей и (в) стоячей волн, возбужденных на поверхности плоского зеркала. Рассчитано спектральное распределение числа излученных квантов для безмассового поля (формулы (16), (23) и (29) соответственно). В случае (а) рассчитана также полная энергия излучения (18), которая вновь совпадает с результатом, полученным путем перенормировки тензора энергии-импульса [5]. В случае (б) излучение имеет место только при фазовой скорости бегущей волны больше скорости света. И наконец, в случае (в) кванты излучаются в области частот $(0, \omega_0)$, где ω_0 — частота стоячих, например, ультразвуковых колебаний, возбужденных на поверхности плоского зеркала.

Авторы признательны участникам общепрофессионального семинара ИППФ НАН Армении и, в частности, проф. А. Р. Мкртчяну за ценные обсуждения и критические замечания.

Работа выполнена в рамках гранта 96-703 Министерства науки и образования Республики Армения.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. А. А. Гриб, С. Г. Мамаев, В. М. Мостепаненко. Квантовые эффекты в интенсивных внешних полях. М. Атомиздат, 1980.
2. Н. Биррел, П. Девис. Квантованные поля в искривленном пространстве-времени. М., Мир, 1984.
3. Л. Ш. Григорян, А. А. Саарян. Известия НАН Армении, Физика, 32, 223 (1997).
4. W. R. Walker. Phys. Rev. D, 31, 767 (1985).
5. L. H. Ford, A. Vilenkin. Phys. Rev. D, 25, 2569 (1982).

ՍԿԱԼԱՐ ՄԱՍՆԻԿՆԵՐԻ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ՃԱՌԱԳԱՅԹՈՒՄԸ ՇԱՐԺՎՈՂ ՀԱՅԵԼԻՆԵՐՈՎ: II.

Լ. Շ. ԳՐԻԳՈՐՅԱՆ, Ա. Ա. ՍԱՀԱՐՅԱՆ

Դիտարկված են արագացումով շարժվող հայելիների կողմից առաքված սկալյար դաշտի քվանտների համար աշխատանքի առաջին մասում ստացված ընդհանուր բանաձևի կիրառությունները: Հետազոտված են հարթ հայելու տատանման տարբեր դեպքեր, ներառյալ հայելու մակերևույթին զրգոված ակուստիկ ալիքների դեպքը:

QUANTUM RADIATION OF SCALAR PARTICLES BY MOVING MIRRORS. II.

L. SH. GRIGORIAN, A. A. SAHARIAN

Applications of the general formula derived in our previous paper for the number of scalar field's quanta emitted by accelerated mirrors, are considered. Various cases of the flat mirrors vibrations are investigated including the case of acoustic waves excited on the surface of the mirror.

ИЗЛУЧЕНИЕ БЫСТРОЙ ЧАСТИЦЫ В ИНВЕРСНОЙ СРЕДЕ

Н. А. КОРХМАЗЯН, Л. А. ГЕВОРГЯН

Армянский государственный педагогический институт им. Х. Абовяна,

Ереванский физический институт

(Поступила в редакцию 15 февраля 1997г.)

Исследованы рентгеновское переходное и черенковское излучения быстрой частицы в инверсной среде. Получено спектральное распределение энергии этих излучений, а также выражения для полной энергии и числа излученных квантов. Показано, что черенковское излучение в такой среде может быть использовано для создания счетчиков элементарных частиц сколь угодно больших энергий, а также как интенсивный источник жестких квантов.

В течение последних десятилетий успешно развивалась теория переходного излучения, что привело к созданию РПИ (рентгеновское переходное излучение) детекторов частиц высоких энергий [1]. Эти детекторы с удовлетворительной эффективностью используются во многих научных центрах для идентификации частиц высоких энергий с лоренц-фактором γ порядка $10^3 \div 10^5$. Основные трудности РПИ-детекторов и ограниченная энергетическая область их применимости, в конечном счете, связаны со слабостью РПИ. Поэтому актуален поиск новых, более эффективных методов решения этой проблемы.

В настоящей работе исследуется излучение релятивистской заряженной частицы в инверсной среде, в жесткой области частот.

1. РПИ в инверсной среде

Как известно [1, 2], РПИ релятивистских частиц на границе раздела среда—вакуум испускается вдоль движения частицы в области частот, намного превышающих атомные. При этом диэлектрическая проницаемость среды представляется в виде

$$\epsilon = 1 - \frac{\omega_0^2}{\omega^2} + i \frac{\mu c}{\omega}, \quad \omega \gg \omega_0. \quad (1)$$

Здесь ω_0 —плазменная частота среды, а $\mu = \mu(\omega)$ —линейный показатель поглощения в среде. Частотное распределение этого излучения дается формулой [2]

$$\frac{dW}{d\omega} = \frac{e^2}{\pi c} \int_0^\infty \left| \frac{1}{x+1} - \frac{1}{x+x_0} \right|^2 x dx, \quad (2)$$

где введены обозначения

$$x = x_0 - i x_0, \quad x_0 = 1 + \frac{1}{\xi^2}, \quad x_0 = \frac{\mu c}{\omega_0 \xi} \gamma, \quad \xi = \frac{\omega}{\omega_k}, \quad (3)$$

$$\omega_k = \omega_0 \gamma, \quad \gamma \gg 1, \quad \xi \gg \frac{1}{\gamma}, \quad x = (\gamma \theta)^2,$$

а θ — угол излучения. Верхний предел для переменной интегрирования принят за бесконечность, так как значение интеграла не зависит от этого предела. Интегрирование в (2) дает

$$\frac{d\omega}{d\xi} = \frac{e^2 \omega_0}{\pi c} \gamma f(\xi), \quad (4)$$

$$f(\xi) = \frac{x_0^2 + x_0^2 - 1}{(x_0 - 1)^2 + x_0^2} \ln(x_0^2 + x_0^2)^{1/2} + \left[\frac{2x_0}{x_0 - 1 + x_0^2} - \frac{x_0}{x_0} \right] \left(\frac{\pi}{2} - \arctg \frac{x_0}{x_0} \right) - 1.$$

Для прозрачных сред, когда $x_0 \rightarrow 0$, имеем

$$f(\xi) = (1 + 2\xi^2) \ln \frac{1 + \xi^2}{\xi^2} - 2. \quad (5)$$

Проинтегрировав это выражение в пределах $0 < \xi < \infty$, получим формулу Гарибьяна

$$W_{\Gamma} = \frac{e^2 \omega_0}{3c} \gamma. \quad (6)$$

Для инверсной среды вместо (1) имеем [3,4]

$$\varepsilon = 1 + \frac{\omega_0^2}{\omega^2} - i \frac{|\mu|c}{\omega}. \quad (7)$$

Для интенсивности излучения получаем ту же формулу (4), где, однако,

$$x_0 = x_0 + i x_0, \quad x_0 = 1 - \frac{1}{\xi^2}, \quad x_0 = \frac{|\mu|c}{\omega_0 \xi} \gamma. \quad (8)$$

В пределе при $|\mu| \rightarrow 0$, знаменатель второго слагаемого в (2) принимает вид

$$x + x_0 \rightarrow (\gamma \theta)^2 - \left(\frac{1}{\xi^2} - 1 \right). \quad (9)$$

Отсюда следует, что в области частот $\xi > 1$ излучение имеет переходную природу, и вместо (5) имеем

$$f(\xi) = (1 - 2\xi^2) \ln \frac{\xi^2 - 1}{\xi^2} - 2. \quad (10)$$

При очень больших частотах ($\omega \gg \omega_k$) функции (10) и (5) ведут себя одинаково ($f \sim \omega^{-4}$). Основное отличие этих функций проявляется вбли-

зи критической частоты $\xi=1$, где в отличие от (5), формула (10) дает бесконечность для функции $f(\xi)$. Однако полная излученная энергия за критической частотой конечна:

$$W = \frac{e^2 \omega_0}{3c} \gamma \frac{2(1 - \ln 2)}{\pi}. \quad (11)$$

2. Черенковское излучение в инверсной среде

Большой интерес представляет излучение в инверсной среде в области частот $\xi < 1$. Здесь излучение с частотой ξ испускается под углом

$$\theta_r = \left(\frac{\omega_0^2}{\omega^2} - \frac{1}{\gamma^2} \right)^{1/2}, \quad (12)$$

поскольку (9) обращается в нуль, а интенсивность — в бесконечность. Заметим, что выражение (12) определяет угол черенковского излучения.

Для этой области частот из (4) находим

$$\frac{dW}{d\omega} = \frac{e^2}{c} \frac{|x_0|}{x_0} = \frac{e^2 \omega}{c^2} \left(\frac{\omega_0^2}{\omega^2} - \frac{1}{\gamma^2} \right) \frac{1}{|\mu|}, \quad (13)$$

где $1/|\mu|$ для обычных сред называется длиной поглощения.

Как и следовало ожидать, формула (13) описывает спектральное распределение жесткого черенковского излучения.

Выражение (13) получается также из формулы (1.44) монографии [1]. В случае пластины в (13) $1/|\mu|$ заменяется толщиной пластины a . Кроме этого, добавляется множитель $\exp(a|\mu|)$, который при $|\mu| \rightarrow 0$ превращается в единицу.

Для интенсивности и числа квантов с единицы пути пробега в интервале частот $k_1 \omega_0 < \omega < k_2 \omega_0$ ($1/k_1 > \theta > 1/k_2$) получаем

$$\frac{dW}{dz} = \frac{e^2 \omega_0^2}{c^2} \left(\ln \frac{k_2}{k_1} - \frac{k_2^2 - k_1^2}{2\gamma^2} \right); \quad \frac{dN}{dz} = \frac{e^2 \omega_0}{\hbar c^2} \cdot \frac{k_2 - k_1}{k_2 k_1} \left(1 - \frac{k_2 k_1}{\gamma^2} \right), \quad (14)$$

где $\gamma > k_2 > k_1 \gg 1$. Это излучение сконцентрировано в основном около нижнего края частот. При $k_2 = \gamma \gg k_1$ формулы (14) упрощаются:

$$\frac{dW}{dz} = \frac{e^2 \omega_0^2}{c^2} \left(\ln \frac{\gamma}{k_1} - \frac{1}{2} \right); \quad \frac{dN}{dz} = \frac{e^2 \omega_0}{\hbar c^2} \frac{1}{k_1}. \quad (15)$$

Эти формулы дают принципиальную возможность сконструировать детекторы частиц со сколь угодно большими энергиями. В самом деле, если, например, $k_1 = 100$ и $\hbar \omega_0 = 30$ эВ, то с 1 см пробега излучается 110 квантов с энергиями 3 кэВ и выше.

Излучение может быть использовано также как обильный поток квазимонохроматических жестких квантов, интенсивность которых на несколько порядков превышает интенсивность ондуляторного излуче-

ния. Если электрон с энергией 100 МэВ ($\gamma=200$) проходит через пластину с толщиной 0,1 см и плазменной частотой $\hbar\omega_0=30$ эВ, то излучается $\sim 5,5$ квантов с энергиями (1,2—1,5) кэВ. При этом угол многократного рассеяния не превышает угла излучения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Г. М. Гарибян, Ян-Ши. Рентгеновское переходное излучение. Ереван, изд. АН АрмССР, 1983.
1. М. Л. Тер-Микаелян. Влияние среды на электромагнитные процессы при высоких энергиях. Ереван, изд. АН АрмССР, 1969.
5. Ф. А. Королев. Теоретическая оптика. М., изд. «Высшая школа», 1969.
4. А. А. Соколов, Ю. М. Лоскутов, И. М. Тернов. Квантовая механика. М., 1962.

ԱՐԱԳ ՄԱՍՆԻԿԻ ԺԱՌԱԳԱՅԹՈՒՄՆ ԻՆՎԵՐՍ ՄԻՋԱՎԱՅՐՈՒՄ

Ն. Ա. ՂՈՐԽՄԱԶՅԱՆ, Լ. Ա. ԳԵՎՈՐԳՅԱՆ

Ուսումնասիրված են ունեղենյան անցումային և շերենկովյան ճառագայթումները ինվերս միջավայրում: Ստացված են այդ ճառագայթումների ապեկտրալ բաշխումն, ինչպես նաև ճառագայթված լրիվ էներգիան և քվանտների թիվն արտահայտող բանաձևերը: Ցույց է տրված, որ շերենկովյան ճառագայթումը կարող է օգտագործվել ցանկացած չափով մեծ էներգիա ունեցող, տարրական մասնիկների հաշվիչներ պատրաստելու համար և նաև որպես ինտենսիվ կոշտ ճառագայթման աղբյուր:

RADIATION OF A FAST PARTICLE IN AN INVERSE MEDIUM

N. A. KORKHMAZIAN, L. A. GEVORGIAN

The X-ray transition radiation and Cherenkov radiation in an inverse medium are investigated. The spectral distribution of energy as well as the full energy and photon number of these radiations are obtained. It is shown that the Cherenkov radiation can be used to create the new counters for identification of elementary particles with very high energies. This radiation can serve also as an intensive source of hard photons.

НЕЛИНЕЙНЫЕ ВОЛНОВЫЕ ПУЧКИ В
ПЬЕЗОПОЛУПРОВОДНИКОВОМ СЛОЕ

А. Г. БАГДОЕВ, А. В. ШЕКОЯН, З. Н. ДАНОЯН

Институт механики НАН Армении

(Поступила в редакцию 18 ноября 1996 г.)

Рассматривается распространение квазимонохроматической нелинейной волны в пьезополупроводниковом слое с учетом электронно-концентрационной нелинейности. Впервые для такой среды выведены эволюционные уравнения для падающей и отраженной волны. Получены нелинейные уравнения Шредингера и решения для узких пучков. Показано, что в отличие от ранее рассмотренных сред, например, пьезодиэлектрика, симметрия падающей и отраженной волн не имеет места. Найдены расстояния фокальных пятен для разных случаев толщины слоя и меры фокусировки пучков.

1. *Введение.* В семидесятые и восьмидесятые годы экспериментально и теоретически интенсивно изучались волны в пьезополупроводниках [1—4], что связано с возможностями усиления волны и построения акустических генераторов. Одно из направлений указанных исследований—это изучение нелинейных волн в пьезополупроводниках со специфической токовой (концентрационной) нелинейностью [5,6]. В этих работах исследованы нелинейные стационарные волны в одномерном приближении. В последнее время разработаны методы решения одномерных, двух- и трехмерных нелинейных нестационарных волновых задач для полупространства и слоя в различных (вязкоупругих, пьезодиэлектриках и др.) средах [7—9]. В указанных работах методом эволюционных уравнений и методом нелинейного уравнения Шредингера получены новые аналитические решения, описывающие физические эффекты, которые в предшествующих статьях [5,6] не выявлялись. Для каждой из указанных выше сред вывод нелинейных эволюционных и модулированных (Шредингера) уравнений представляет самостоятельный интерес. Целью настоящей работы является вывод вышеуказанных уравнений для пьезополупроводникового слоя с концентрационной нелинейностью и изучение полученных решений этих уравнений в задачах об узких пучках.

В большинстве акустоэлектронных приборов полупроводниковый элемент пленочный; поэтому в данной работе рассматривается слой пьезополупроводника.

2. *Постановка задачи.* Рассматривается бесконечный, однородный слой электронного пьезополупроводника с толщиной l , торцы которого перпендикулярны к оси x_3 . Пьезополупроводник имеет гексагональную или тетрагональную кристаллическую решетку системы $6mm$ или

4 *mm*. Координатная система выбирается так, чтобы оси x_1 и x_2 находились на одном торце слоя, а ось x_3 была направлена противоположно падающей волне вдоль оси симметрии четвертого или шестого порядка. Плоскость $x_3=0$ свободна от напряжений ($\sigma_{ik}=0$). На плоскости $x_3=l$ задается возмущение в виде гауссовского пучка, которое распространяется до свободного торца и отражается от него, регистрируясь на плоскости $x_3=l$.

Предполагается, что в слое есть постоянный электрический ток. Ограничимся рассмотрением только токовой нелинейности, которая появляется при меньших интенсивностях упругой волны, когда другие нелинейности (такие, как упругая, геометрическая) не проявляются [3].

Так как упругую и геометрическую нелинейности не учитываем, то уравнения задачи в Лагранжевых и Эйлеровых координатах совпадают.

Учитывая вышесказанное, систему уравнений, описывающую распространение волн в такой среде, где длина свободного пробега электрона намного меньше длины волны, можно записать в виде [10, 11]

$$\rho \frac{\partial^2 u_j}{\partial t^2} = (c_{13} + c_{44}) \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_j \partial x_3} + c_{44} \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_3^2} - e_{15} \frac{\partial E_j}{\partial x_3} - e_{31} \frac{\partial E_3}{\partial x_j} \quad (j=1, 2), \quad (1)$$

$$\rho \frac{\partial^2 u_3}{\partial t^2} = (c_{13} + c_{44}) \frac{\partial}{\partial x_3} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \right) + c_{44} \Delta_{\perp} u_3 + \quad (2)$$

$$+ c_{33} \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_3^2} - e_{15} \left(\frac{\partial E_1}{\partial x_1} + \frac{\partial E_2}{\partial x_2} \right) - e_{33} \frac{\partial E_3}{\partial x_3},$$

$$- \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\sigma_1}{q} \left(\frac{\partial E_1}{\partial x_1} + \frac{\partial E_2}{\partial x_2} \right) + \frac{\sigma_3}{q} \frac{\partial E_3}{\partial x_3} - v_d \frac{\partial n}{\partial x_3} + \quad (3)$$

$$+ d_{33} \frac{\partial^2 n}{\partial x_3^2} = \mu_{33} \left(n \frac{\partial E_3}{\partial x_3} + E_3 \frac{\partial n}{\partial x_3} \right),$$

$$(e_{31} + e_{15}) \frac{\partial}{\partial x_3} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \right) + e_{15} \Delta_{\perp} u_3 + e_{33} \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_3^2} + \quad (4)$$

$$+ \varepsilon_{11} \left(\frac{\partial E_1}{\partial x_1} + \frac{\partial E_2}{\partial x_2} \right) + \varepsilon_{33} \frac{\partial E_3}{\partial x_3} = -qn,$$

$$\frac{\partial E_3}{\partial x_j} = \frac{\partial E_j}{\partial x_3} \quad (j=1, 2), \quad (5)$$

где ρ —плотность среды, u_j и u_3 —компоненты поперечных и продольных смещений, c_{ik} , ε_{ik} , σ_i , e_{ik} —соответственно модули упругости, диэлектрической проницаемости, удельной электропроводности и пьезомодули пьезополупроводника μ_{33} —подвижность электронов, E_i —компоненты электрического поля, n —индуцированное волной изменение концен-

трации электронов, q —заряд электронов, $v_d = -\mu_{33} E_3^0$ —дрейфовая скорость электронов, E_3^0 —постоянное электрическое поле, направленное по оси x_3 в направлении отраженной волны, d_{33} —коэффициент продольной диффузии, $\Delta_{\perp} = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}$.

3. Вывод эволюционных уравнений. В работах [8, 9, 12, 13] для высокочастотной асимптотики записано решение квазилинейных систем уравнений в виде суммы двух функций, каждая из которых зависит от своего эйконала. В предположении равенства нулю в основных порядках малости средних значений искомых функций по своим эйконалам (что выполняется для задач о дифракционных пучках) показано, что система уравнений расщепляется на два независимых нелинейных уравнения.

В настоящей работе, поступая аналогичным образом, решения системы уравнений (1—5) ищутся в виде суммы двух функций, одна из которых соответствует падающей волне и однократно штрихована, а вторая—отраженной волне и двукратно штрихована.

Сперва рассмотрим падающую волну. В системе однократно штрихованных уравнений введем новую переменную $\tau_1 = \tau'_1 - t$, где $\tau'_1 = (l - x_3)v^{-1}$, v —линейная фазовая скорость.

Примем порядки физических величин, как в нелинейной акустике [14, 15], а именно, для нормальной невозмущенной волны скорости частицы среды $\frac{\partial u'_3}{\partial \tau'_1}$ принимаются за основной порядок $\delta \left(\frac{\partial u'_3}{\partial \tau'_1} \sim \delta \right)$,

тогда для размеров возмущенной области имеет место $\frac{\partial}{\partial x_j} \sim \delta^{-1/2} (j = 1, 2)$, $\frac{\partial}{\partial \tau_1} \sim \delta^{-1}$ и для поперечных компонент скорости $\frac{\partial u_{1,2}}{\partial \tau_1} \sim \delta^{3/2}$. На основании анализа типичных пьезополупроводников при выбранных оси симметрии и направлении распространения волны можно ввести следующие порядки: $E'_3 \sim \delta$, $E'_j \sim \delta^{3/2}$ ($j = 1, 2$), $n' \sim \delta$, $d_{33} \sim \delta$, а также порядки электромеханической связи типа $e_{33}^2 (2c_{33}\epsilon_{33})^{-1} \sim \delta$, отношение удельной электропроводности к диэлектрической проницаемости типа $\sigma_3 \epsilon_{33}^{-1} \sim \delta^{-1}$. Нелинейный коэффициент эволюционного уравнения, полученный ниже, имеет порядок δ^{-1} .

После перехода к новой переменной τ_1 и оставляя в системе однократно штрихованных уравнений члены с наибольшими порядками, получаются следующие соотношения:

$$n'(1 + v_d v^{-1}) - \frac{\sigma_3}{v q} E'_3 = 0, \quad \frac{e_{33}}{v} \frac{\partial u'_3}{\partial \tau_1} - \epsilon_{33} E'_3 = 0, \quad (6)$$

$$v^2 = c_{33} v'^{-1} + e_{33}^2 (\rho \epsilon_{33})^{-1}.$$

В следующем порядке сохраняем члены, которые характеризуют дисперсию, диссипацию и нелинейность. Исключив функции E'_1 , u'_j ,



и n' (причем в нелинейном члене функции исключаются, используя соотношения (6)), можно для скорости частиц среды в падающей волне $\psi_1 = \frac{\partial u_3}{\partial \tau_1}$ получить следующее эволюционное уравнение:

$$A \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial t \partial \tau_1} + B \frac{\partial^3 \psi_1}{\partial t \partial \tau_1^2} - L \Delta_{\perp} \frac{\partial \psi_1}{\partial \tau_1} + C \Delta_{\perp} \psi_1 - \frac{L d_{33}}{v^2} \Delta_{\perp} \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial \tau_1^2} + \\ + Q_1 \frac{\partial^4 \psi_1}{\partial \tau_1^3 \partial t} + P \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial \tau_1^2} = \Gamma \frac{\partial}{\partial \tau_1} \left(\psi_1 \frac{\partial \psi_1}{\partial \tau_1} \right), \quad (7)$$

где

$$A = 2\sigma_3 \varepsilon_{33}^{-1}, \quad B = -2(1 + v_d v^{-1}), \quad C = \frac{\sigma_3 Q}{\rho \varepsilon_{33}} - \frac{e_{33}^2 \sigma_3}{\rho \varepsilon_{33}^2}, \\ L = \frac{e_{33}(1 + v_d v^{-1})}{\rho \varepsilon_{33}} [Q \varepsilon_{33} e_{33}^{-1} + (e_{31} + e_{15}) N v^{-1} + e_{13} - \varepsilon_{11} \varepsilon_{33}^{-1} e_{33}], \\ N = [(C_{13} + C_{44}) + e_{33} \varepsilon_{33}^{-1} (e_{13} + e_{31})] v^{-1} (e - C_{44} v^{-2}) \quad (8) \\ Q = (C_{13} + C_{44}) N v^{-1} + C_{44} + e_{15} e_{33} \varepsilon_{33}^{-1}, \quad P = -e_{33}^2 \sigma_3 (\rho \varepsilon_{33}^2 v^2)^{-1} \\ Q_1 = -2d_{33} v^{-2}, \quad \Gamma = 2\mu_{33} e_{33}^3 \sigma_3 \rho^{-1} v^{-4} \varepsilon_{33}^{-3} (1 + v_d v^{-1}).$$

В уравнении (7) коэффициенты A и B характеризуют дисперсию, а Q_1 и P — электронное поглощение.

Как видно из выражения для нелинейного коэффициента в (8), при $v_d v^{-1} = -1$ Γ становится бесконечным; это означает, что метод эволюционных уравнений не применим для этого значения v_d .

Как показано впервые в работе [16], уравнение (7) отличается от стандартной формы эволюционного уравнения, полученной для широкого класса сред [8, 9, 17, 18]. Это связано с более сложным видом дисперсионных соотношений для пьезополупроводников.

Для отраженной волны вместо τ_1 вводится переменная $\tau_2 = \tau_1' - t$, $\tau_2' = v^{-1}(l + x_3)$. Поступая аналогично, как и для падающей волны, можно получить уравнение для $\psi_2 = -\frac{\partial u_2}{\partial \tau_2}$ типа (7), где v заменено на $-v$, ψ_1 на ψ_2 и τ_1 на τ_2 . Как видно из соотношений (8), в отличие от пьезодиэлектриков [9] симметрия для падающих и отраженных волн не имеет места.

4. Вывод уравнений модуляции для квазимонохроматической волны. В случае квазимонохроматической волны решение уравнения (7) будем искать в следующем виде:

$$\psi_1 = \frac{1}{2} \{ A_1(\tau_1', x_1, x_2, t) \exp[i\alpha \tau_1 - (\nu + i\omega)t] + \\ + A_2(\tau_1', x_1, x_2, t) \exp[2(i\alpha \tau_1 - (\nu + i\omega)t)] + A_3(\tau_1', x_1, x_2, t) + \text{к.с.} \}, \quad (9)$$

где A_1 и A_2 — амплитуды первой и второй гармоник, а A_3 — свободный член, обуславливающий не осциллирующую часть решения, α — основ-

ная частота, имеющая порядок δ_1^{-1} , причем $\delta_1^{-1} \ll \delta^{-1}$, ω — приращение частоты за счет дисперсии, ν — коэффициент затухания. При этом предполагается, что $\omega, \nu \ll \alpha$.

Подставляя решение (9) в уравнение (7), приравнявая линейные недифференцируемые члены, содержащие первую гармонику, получим линейные дисперсионные соотношения

$$\omega = - \frac{\alpha e_{33}^2}{2\varepsilon_{33}c_{33}} \cdot \frac{\sigma_3 \varepsilon_{33}^{-1} (\sigma_3 \varepsilon_{33}^{-1} + \alpha^2 d_{33} v_0^{-2})}{x^2 (1 + v_0^{-1} v_d)^2 + (\sigma_3 \varepsilon_{33}^{-1} + \alpha^2 d_{33} v_0^{-2})^2}, \quad (10)$$

$$\nu = \frac{e_{33}^2}{2c_{33}\varepsilon_{33}} \cdot \frac{\alpha^2 (1 + v_0^{-1} v_d) \sigma_3}{\varepsilon_{33} [x^2 (1 + v_0^{-1} v_d)^2 + (\sigma_3 \varepsilon_{33}^{-1} + \alpha^2 d_{33} v_0^{-2})^2]}, \quad (11)$$

где

$$v_0^2 = c_{33} \rho^{-1}, \quad \alpha = kv \approx kv_0 [1 + e_{33}^2 (2c_{33} \varepsilon_{33})^{-1}].$$

Соотношения (10) и (11) совпадают с известными формулами для поглощения и дисперсии, выведенными в [2, 3, 10], если заменить знак у v_0 .

В уравнении для амплитуды второй гармоники предполагая, что $\omega t_1 \gg 1$, где t_1 — характерное время, причем $t_1 \approx (L - x_3) v^{-1}$, дифференцируемые члены второй гармоники можно отбросить. Тогда уравнение для амплитуды второй гармоники примет вид

$$A_2 = - \frac{1}{4} \Gamma \alpha A_1^2 \lambda^{-1}, \quad (12)$$

где

$$\lambda = [\omega A + 2\alpha \nu B - \alpha^2 P - 4\alpha^2 \omega Q_1 + i(2\alpha \omega B - \nu A + 4\alpha^2 \nu Q_1)].$$

Для типичных задач стационарной дифракции, где $\frac{\partial A_{1,2}}{\partial t} = 0$ и оператор $\Delta_{\perp} A_{1,2} \sim \delta^{-1} A_{1,2}$, слагаемые с A_2 в уравнениях для $A_{1,2}$ не войдут.

Исключая A_2 с помощью выражения (12), для уравнения амплитуды первой гармоники следует

$$\begin{aligned} \frac{\partial A_1}{\partial \tau_1} \{ [3\alpha^2 \nu Q_1 - \nu A + (2\omega - \alpha) \alpha B] + i[(\alpha + \omega) A - 2\alpha \nu B + 2\alpha P + 3\omega \alpha^2 Q_1] \} + \\ + \left(C + \frac{\alpha^2 L d_{33}}{v^2} - i\alpha L \right) \Delta_{\perp} A_1 = \frac{\alpha^2 \Gamma^2}{8} \lambda^{-1} |A_1|^2 A_1 \exp(-2\nu \tau_1). \end{aligned} \quad (13)$$

Отбрасывая заведомо малые члены в коэффициентах уравнения (13), можно получить

$$i\alpha \frac{\partial A_1}{\partial \tau_1} + \frac{C}{A} \Delta_{\perp} A_1 = P_2 (x_1 + ix_2) |A_1|^2 A_1, \quad (14)$$

где

$$P_2 = \frac{\Gamma^2 \alpha^3 \exp(-2\nu \tau_1)}{8A(x_1^2 + x_2^2)}, \quad x_1 = A\omega + 2\alpha \nu B - \alpha^2 P + 4\alpha^2 \omega Q_1, \quad (15)$$

$$x_2 = vA - 2x\omega B + 4x^2vQ_1.$$

В коэффициентах уравнения (14) отброшены члены, не содержащие большой множитель x .

Для отраженной волны решение уравнения для ψ_2 будем искать в виде (9), где следует заменить A_1 на A_1' , τ_1 на τ_1' , v и ω на v' и ω' (последняя штрихованная пара получается из (10) и (11) заменой v_0 на $-v_0$). Тогда для A_1' получим уравнение

$$ix \frac{\partial A_1'}{\partial \tau_1'} + \frac{C}{A} \Delta_{\perp} A_1' = P_2'(x_1' + ix_2') |A_1'|^2 A_1', \quad (16)$$

где штрихованные коэффициенты получаются из (15) и (8) заменой v на $-v$. Из соотношений (8) и (15) видно, что для уравнений (14) и (16) симметрия не имеет места. Здесь и выше эта несимметричность обусловлена наличием электрического тока.

5. Уравнения для безразмерной ширины пучка, радиуса кривизны волны и набега фазы на оси пучка. Вывод уравнений, указанных в заглавии пункта, будет сделан для падающей волны, а для отраженной получится заменой соответствующих коэффициентов на штрихованные.

Записывая $A_1 = a_1 \exp(i\varphi_1)$, где φ_1 — возмущенный эйконал, а a_1 — действительная амплитуда, и подставляя в уравнение (14), отделяя мнимые и действительные части, переходя к цилиндрическим координатам для осесимметричной задачи, получим уравнения для a_1 и φ_1 . Решение последних ищется в виде

$$a_1 = b_1 f_1^{-1} \exp \left[-\frac{r_1^2}{2} (r_1 f_1)^{-2} \right], \quad \varphi_1 = \sigma_1'(\tau_1') + \frac{r_1^2}{2} R_1^{-1}(\tau_1'), \quad (17)$$

где f_1 — безразмерная ширина пучка, σ_1' — набег фазы волны на оси пучка, $\alpha R_1 v_0^{-1}$ — переменный радиус кривизны фронта волны, b_1 и r_1 — амплитуды и радиус пучка на границе $x_3 = l$. Подставляя (17) в уравнения для a_1 и φ_1 , обычным образом [9] получим следующую систему уравнений:

$$R_1^{-1} = \frac{\alpha A}{2Cf_1} \frac{df_1}{d\tau_1'} + \frac{x_2 P_2 A b_1^2}{2Cf_1^2}, \quad (18)$$

$$\frac{d\sigma_1'}{d\tau_1'} = \frac{2C}{\alpha A r_1^2 f_1^2} - \frac{P_2 x_1 b_1^2}{\alpha f_1^2} \equiv G f_1^{-2}, \quad (19)$$

$$\frac{d^2 f_1}{d\tau_1'^2} = \frac{M}{f_1^3} - \frac{P_2 x_2 v A b_1^2}{\alpha C f_1}, \quad (20)$$

$$\text{где } M = \alpha^{-2} \left(\frac{4C^2}{A^2 r_1^4} + \frac{4P_2 x_1 C b_1^2}{A r_1^2} - \frac{4P_2^2 x_2^2 b_1^4}{4} \right). \quad (21)$$

Для отраженной волны имеют место уравнения (18) — (21), где следует индекс один заменить на два для R_1, σ_1', f_1, b_1 и r_1 , а остальные величины заменить соответствующими штрихованными величинами.

6. *Граничные условия.* Из постановки задачи ясно, что для механических величин должны быть заданы граничные условия на торцах слоя ($x_3=0$, $x_3=l$). Первое из них в плоскости $x_3=l$ или $\tau_1=0$ относится к падающей волне. Предполагается, что в этой плоскости задается пучок с гауссовским профилем и выполняются следующие условия:

$$f_1(0)=1, \quad \frac{df_1(0)}{d\tau_1}=F, \quad \sigma_1(0)=0, \quad F=\frac{2C}{\alpha A} \left[R_1^{-1}(0) - \frac{\alpha_2 P_2 b_1^2 A}{2C} \right]. \quad (22)$$

Уравнения (18)–(20) будем решать с граничными условиями (22). Для отраженной волны граничные условия заданы в плоскости $x_3=0$, в которой предполагается, что $\sigma_{31}=\sigma_{32}=\sigma_{33}=0$. В наивысшем порядке эти уравнения расщепляются, так как ограничиваемся изучением пучка квазипродольных волн. В наивысшем порядке условие $\sigma_{33}=0$ дает

$$\frac{\partial u_3}{\partial x_3}=0. \quad (23)$$

В наивысшем порядке автоматически выполняется условие $\sigma_{31}=\sigma_{32}=0$.

Граничное условие $D_3-D'_3=\kappa$ при $x_3=0$ (где D'_3 — нормальная компонента электрического смещения вне слоя, а κ — поверхностная плотность заряда) в случае $D'_3=0$, т.е. слоя, помещенного внутри металлического проводника, дает $D_3=\kappa$, что служит для определения κ .

Поступая аналогично [9], можно получить для параметров пучка в плоскости $x_3=0$, $\tau_2=l v^{-1}$ следующие условия:

$$b_1=b_2, \quad f_1\left(\frac{l}{v}\right)=f_2\left(\frac{l}{v}\right), \quad R_1\left(\frac{l}{v}\right)=R_2\left(\frac{l}{v}\right), \quad \sigma_1\left(\frac{l}{v}\right)=\sigma_2\left(\frac{l}{v}\right), \quad (24)$$

$$\frac{df_1\left(\frac{l}{v}\right)}{d\tau_1} = \frac{df_2\left(\frac{l}{v}\right)}{d\tau_2}.$$

Уравнения (18)–(20), написанные для отраженной волны, следует решать с граничными условиями (24). Из второго условия (24) следует, что всюду $\tau_1=\tau_2$.

7. *Решение уравнений для безразмерной ширины пучка.* Решение уравнения (20) будем искать в случае слабого и сильного поглощения. В первом случае χ_1 и χ_2 малы, и экспоненты, входящие в $\chi_{1,2}$ и $\chi_{1,2}$, можно считать равными единице. В случае сильного поглощения экспоненты можно считать нулями и задача будет линейной. В обоих случаях сильного и слабого поглощения второе слагаемое в правой части (20) можно отбросить.

С учетом вышесказанного решение уравнения (20) с граничными условиями (22) для $M>0$ и $M<0$ имеет следующий вид:

$$f_1^2 = \frac{M}{F^2 + M} + (F^2 + M) \left[\tau' + \frac{l}{v} \mp \frac{|F|}{F^2 + M} \right]^2, \quad (25)$$

где $\tau' = -\frac{x_3}{v}$, $F = \frac{df_1(-\frac{l}{v})}{d\tau'}$. В формуле (25) следует взять знак минус для случая $F < 0$ и знак плюс для $F > 0$.

Уравнение (20) для отраженного пучка с граничными условиями (24) имеет решение в следующем виде:

$$f_2^2 = \left[F_1^2 + \frac{M'}{f_1^2(0)} \right] [\tau'' \pm |F_1| f_1(0)]^2 + \frac{M'}{F_1^2 + M' f_1^{-2}(0)}, \quad (26)$$

где $F_1 = df_1(0)/d\tau'$, $\tau'' = x_3 v^{-1}$. Выбор знаков в (26) будет сделан в дальнейшем.

Решения уравнений (18) и (19) не приводятся, так как для дальнейших исследований они не понадобятся.

8. Анализ полученных решений. Рассмотрение будет ограничено случаем фокальных пятен, который соответствует $M > 0$, $F < 0$. Тогда в (25) можно в скобках подставить знак плюс и отбросить знак модуля. Причем полученная формула годится как для $\tau' < \tau'_{\text{фн}}$, так и для $\tau' > \tau'_{\text{фн}}$, где

$$\tau'_{\text{фн}} = -\frac{l}{v} - \frac{F}{F^2 + M}. \quad (27)$$

Формула (27) получается из условия $\frac{df_1}{d\tau'} = 0$.

При значении l , для которого $\tau'_{\text{фн}} < 0$, фокальное пятно находится внутри слоя, в случае $\tau'_{\text{фн}} > 0$ — вне слоя и при $\tau'_{\text{фн}} = 0$ — на границе слоя. Последний случай будет при $l = -\frac{vF}{F^2 + M}$, тогда формула (25) упрощается и принимает вид

$$f_1^2 = \frac{M}{F^2 + M} + (F^2 + M)(\tau')^2. \quad (28)$$

Для отраженной волны ограничимся случаем $M' > 0$. Формулу (25) можно записать также в виде

$$f_1^2 = \frac{M}{F^2 + M} + (F^2 + M)(\tau' - \tau'_{\text{фн}})^2. \quad (29)$$

Из (29) определяем $\frac{df_1(0)}{d\tau'} = -\tau'_{\text{фн}} \frac{F^2 + M}{f_1(0)}$ и знак $\frac{df_1(0)}{d\tau'}$ определяется знаком $\tau'_{\text{фн}}$. Когда $\tau'_{\text{фн}} < 0$, то $\frac{df_1(0)}{d\tau'} > 0$, $\frac{df_2(0)}{d\tau''} > 0$, и в (26) следует брать знак плюс. При $\tau'_{\text{фн}} > 0$

$$\frac{df_1(0)}{d\tau'} < 0, \quad \frac{df_2(0)}{d\tau''} < 0,$$

тогда в (26) выбирается знак минус. В обоих случаях в формуле (26) вторая квадратная скобка может быть записана в виде

$$[\tau'' + F_1 f_1(0)]. \quad (30)$$

Фокальное пятно отраженной волны находится из условия $\frac{df_2}{d\tau''} = 0$.

Тогда, приравнявая нулю (30), можно найти

$$\tau_{\text{фп}}^* = -F_1 f_1(0). \quad (31)$$

При $F_1 < 0$ $\tau_{\text{фп}}^*$ находится внутри слоя, тогда как $\tau_{\text{фп}}^*$ находилось вне слоя, а при $F_1 > 0$ $\tau_{\text{фп}}^*$ находится вне слоя, в то время как $\tau_{\text{фп}}^*$ находится внутри слоя.

В случае $\tau_{\text{фп}}^* = df_1(0)/d\tau' = df_2/d\tau'' = 0$, учитывая, что $f_1^2(0) = M(F^2 + M)^{-1}$, формулу (26) можно написать в виде

$$f_2^2 = \frac{M'}{f_1^2(0)} (\tau'')^2 + f_1^2(0) = \frac{M'(F^2 + M)}{M} (\tau'')^2 + M(F^2 + M)^{-1}. \quad (32)$$

Итак, $\tau_{\text{фп}}^* = 0$, $\tau_{\text{фп}}^* = 0$, т. е. обе фокальные точки находятся на свободной границе среды.

Заключение. В настоящей работе для слоя пьезополупроводника с концентрационной нелинейностью получены более сложное эволюционное уравнение и нелинейное уравнение Шредингера. Показано, что решения, известные из работ [8, 9], пригодны также и для этих более сложных уравнений. Однако в отличие от сред, рассмотренных в [8, 9], в пьезополупроводниках падающие и отраженные пучки из-за отличия коэффициентов в уравнениях не симметричны, что обусловлено электрическим током. Выведены формулы для расстояний фокальных пятен, как для отраженных, так и для падающих волн. Показано, что они совпадают на границе при определенной толщине слоя. Из расчетов следует, что для дифракционных задач неосциллирующие части решения пренебрежимо малы и не влияют на уравнения для амплитуд первой и второй гармоник. Указан предел применения развиваемой в данной работе теории.

Полученные результаты могут быть применены при расчетах акусто-электронных устройств, линий задержки, для исследований свойств материалов пьезополупроводников, а также в других технических задачах.

ЛИТЕРАТУРА

1. В. И. Пустовойт. УФН, 97, 257 (1969).
2. Дж. Такер, В. Рэмpton. Гиперзвук в физике твердого тела. М., 1975.
3. В. А. Красильников, В. В. Крылов. Введение в физическую акустику. М., Мир, 1984.

4. М. К. Балакирев, И. А. Гилинский. Волны в пьезокристаллах. Новосибирск, Наука, 1982.
5. Ю. В. Гуляев, ФТТ, 12, 415(1970).
6. Р. К. Теп. Phys. Rev., 171, 970 (1968).
7. А. Г. Багдоев, А. В. Шекоян. Изв. АН АрмССР, Механика, 40 №2, 14(1987).
8. А. Г. Багдоев, А. В. Шекоян. Изв. АН Армении, Механика, 44, №1, 28(1991).
9. А. Г. Багдоев, А. В. Шекоян. Изв. НАН Армении, Механика, 48, №1, 64(1995).
10. Дж. Мак-фи. В кн.: «Физическая акустика» под ред. У. Мэсона, т. IV, ч. 1, М., Мир, 1969.
11. А. Г. Багдоев, А. В. Шекоян. Изв. АН АрмССР, Механика, 34, №4, 3(1981).
12. В. В. Канер, О. В. Руденко. Вестник МГУ, сер. физика, астрономия, 19, 78(1978).
13. P. Carbonaro. Jour. of Appl. Math. and Phys., 37, № 1, 43 (1986).
14. A. G. Bagdov, A. V. Shekoyan. Phys. stat. sol. (a), 89, 499 (1985).
15. О. В. Руденко, С. И. Солуян. Теоретические основы нелинейной акустики. М., Наука, 1975.
16. А. В. Шекоян. В сб. IV Симпозиума «Теоретические вопросы магнитоупругости». Ереван, Изд. ЕГУ, 1989, с. 203.
17. А. Г. Багдоев, Л. Г. Петросян. Изв. АН АрмССР, Механика, 36, №5, 3(1983).
18. А. Г. Багдоев, Г. Г. Оганян. Изв. АН АрмССР, Механика, 37, №1, 34(1984).

NONLINEAR WAVE BEAMS IN A PIEZOSEMICONDUCTING LAYER

A. G. BAGDOEV, A. V. SHEKOYAN, and Z. N. DANOYAN

The propagation of quasi-monochromatic nonlinear wave in a piezosemiconducting layer taking into account electron-concentration nonlinearity is considered. For such medium the evolution equations for incoming and reflected waves are derived. Nonlinear Schroedinger equations and solutions for narrow beams are obtained. It is shown that symmetry of incoming and reflected waves does not take place. The focusing of beams is investigated.

ՈՉ ԳԾԱՅԻՆ ԱԼԻՔԱՅԻՆ ՓՆՋԵՐԸ ՊՅԵՏՈՒԿԻՍԱԶԱՂՈՐԴԻՉ ՇԵՐՏՈՒՄ

Ա. Գ. ԲԱԳԴՈԵՎ, Ա. Վ. ՇԵԿՈՅԱՆ, Զ. Ն. ԴԱՆՈՅԱՆ

Աշխատանքում ուսումնասիրված են քվազիմոնոքրոմատիկ ոչ գծային ալիքային փնջերի տարածման օրինաչափությունները կիսահաղորդիչ շերտում, որի մի եզրը ազատ է լարումներից: Հաշվի առնելով միայն էլեկտրոնային կոնցենտրացիոն ոչ գծայնությունը, առաջին անգամ նշված միջավայրում արտածված են ոչ գծային էվոլյուցիոն և Շրեդինգերի հավասարումները, որոնք լուծված են նեղ փնջերի համար: Ցույց է տրված, որ ընկնող և անդրադարձող ալիքների համար սիմետրիա գոյություն չունի:

УЧЕТ ТУННЕЛЬНЫХ ПЕРЕХОДОВ В ТЕОРИИ
МОНОМОЛЕКУЛЯРНЫХ РЕАКЦИЙ

Г. М. ЧПЛАХЯН, ДЖ. М. МИНАСЯН, Г. А. ЭЛОЯН, К. К. ПЕТРОСЯН

Армянский педагогический институт им. Х. Абовяна

(Поступила в редакцию 19 сентября 1996 г.)

В работе дана методика вычисления констант скоростей мономолекулярных реакций с учетом туннельных переходов. Показано, что полученное выражение совпадает с формулой Слейтера при высоких температурах и при одной координате пути реакции. Показано также, что при низких температурах модель Слейтера дает завышенные результаты для констант скорости.

Как известно [1—3], из существующих теорий о мономолекулярных реакциях только теория Слейтера более или менее позволяет исследовать динамику мономолекулярной реакции. Квантовая теория Слейтера основывается на следующих основных предположениях.

1. Потенциальная функция в зависимости от координат пути реакции принимается параболической и считается, что реакция завершается, когда координата пути реакции q принимает свое критическое значение $q=q_0$ и критическая конфигурация определяется плотностью вероятности критического значения координаты пути реакции $W(q_0)$.

2. При выводе формулы для константы скорости мономолекулярной реакции считается, что все молекулы с равной вероятностью могут принимать критическую конфигурацию, в том числе и туннельным путем, т.е. неявно учитывается и туннельный переход наряду с переходами через энергетический барьер.

3. При конкретных расчетах координата пути реакции отождествляется с какой-то внутренней координатой или, в лучшем случае, с линейной комбинацией внутренних координат [2].

Так как за мономолекулярные превращения ответственны внутримолекулярные колебания превращающейся молекулы или же активного комплекса, а внутренние координаты меняются соответственно форме данного нормального колебания молекулы, то следовательно, когда какая-то координата принимает свое критическое значение $q_j=q_{j0}$, остальные координаты должны принимать соответствующие значения $q_i=q_{i0}$ ($i=1, 2, \dots, j-1, j+1, \dots, s$), где s —число колебательных степеней свободы молекулы. Таким образом, критическая конфигурация должна определяться условной плотностью вероятности того, что координата пути реакции q_j принимает свое критическое значение $q_j=q_{j0}$ при условии, что $q_i=q_{i0}$ ($i=1, 2, \dots, s$), которое верно для одновременных координат путей реакций. А для одновременных координат

Поделив каждое из уравнений (4) соответственно на $N\Delta t_j$ (где Δt_j —время жизни активных комплексов по координате q_j , равное времени прохождения ими участка пути реакции q_j) и усредняя, получим константу скорости χ_j мономолекулярной реакции по каждой координате q_j :

$$\chi_j = - \frac{\Delta N_j}{N\Delta t_j} = 2\{1 - \Phi(a_j)\} W_j V_j^+ \quad (j=1, \dots, s). \quad (5)$$

Средняя константа скорости мономолекулярной реакции по всем координатам путей реакции будет

$$\chi_s = \frac{2}{s} \sum_{j=1}^s [1 - \Phi(a_j)] W_j V_j^+, \quad (6)$$

где $V_j^+ = \langle \frac{\Delta q_j}{\Delta t_j} \rangle$ —средняя скорость изменения координаты q_j в направлении процесса, которая определяется следующим образом:

$$V_j^+ = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \dot{q}_j W(\dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_s) \prod_{i=1}^s d\dot{q}_i, \quad (7)$$

где $\dot{q}_j = \frac{dq_j}{dt}$ —обобщенная скорость, соответствующая координате q_j ,

$W(\dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_s)$ —совместная плотность вероятности обобщенных скоростей. Она имеет следующий вид [5]:

$$W(\dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_s) = \frac{1}{(2\pi)^{s/2} |B|^{1/2} \prod_{i=1}^s \sigma_{\dot{q}_i}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^s b_{ij} \frac{\dot{q}_i \dot{q}_j}{\sigma_{\dot{q}_i} \sigma_{\dot{q}_j}} \right\}. \quad (8)$$

Вычисление интеграла (7) с учетом (8) дает для V_j^+ значение

$$V_j^+ = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sigma_{\dot{q}_j}. \quad (9)$$

Условная плотность вероятности определяется по формуле

$$W_j \left(\frac{q_{j0}}{q_{10}, \dots, q_{s0}} \right) = \frac{W(q_{10}, q_{20}, \dots, q_{s0})}{\int_{-\infty}^{\infty} W(q_{10}, q_{20}, \dots, q_{(j-1)0}, q_j, q_{(j+1)0}, \dots, q_{s0}) \prod_{i=1}^s dq_i}. \quad (10)$$

Подставляя значения W в (10), после несложных преобразований получим для W_j следующее выражение:

путей реакции критическая конфигурация должна определяться совместной плотностью вероятности всех критических значений координат путей реакции. Именно так нами была определена критическая конфигурация в работах [4—6] и была обобщена теория Слейтера для случая s координат путей реакций. Тем самым был устранен первый основной недостаток в модели Слейтера, но остался открытым вопрос: «Какой вклад дают туннельные переходы в константу скорости мономолекулярной реакции?».

Предположим, что в реакционном объеме есть N однотипных молекул. Каждая внутренняя координата является одной из возможных координат путей реакций. Так как столкновения молекул случайны, то при столкновениях разные молекулы могут активироваться по разным внутренним координатам. Определим число активных молекул по каждой координате. Естественно считать, что при $T=0$ переходы могут быть только туннельные, а при $T \neq 0$ переходы осуществляются также и над энергетическим барьером. Число активных молекул по каждой координате q_j ($j=1, \dots, s$) при температуре $T=0$ можно определить следующим образом:

$$N_{aj} = N \left\{ \int_{-\infty}^{-q_j^x} W(q_j) dq_j + \int_{-q_j^x}^{\infty} W(q_j) dq_j \right\} = 2N \{1 - \Phi(a_j)\}, \quad (1)$$

где

$$a_j = \left(\frac{\ln \beta_j^2}{\beta_j^2 - 1} \right)^{1/2}; \quad \beta_j^2 = \frac{\sigma_{q_j}^2}{(\sigma_{q_j}^2)_0}. \quad (2)$$

$(\sigma_{q_j})_0$ — среднеквадратичное отклонение координаты q_j при температуре $T=0$; q_j^x определяется из условия

$$W_0(q_j^x) = W(q_j^x) \quad (j=1, \dots, s), \quad (3)$$

где $W_0(q_j^x)$ — плотность вероятности достижения координаты q_j своего значения q_j^x при нулевой температуре, а $W(q_j^x)$ — при ненулевой; $\Phi(a_j)$ — интеграл вероятности [7].

Молекулы, которые активированы по координате q_j и имеют значения в интервале $q_{j0} - \Delta q_j$ и $q_{j0} + \Delta q_j$, будем называть активными комплексами. Число таких активных комплексов будет

$$-\Delta N_j = N_{aj} W_j \left(\frac{q_{j0}}{q_{j0}, \dots, q_{s0}} \right) \Delta q_j \quad (j=1, \dots, s), \quad (4)$$

где Δq_j соответствует участку пути реакции по координате q_j , а $W_j \left(\frac{q_{j0}}{q_{j0}, \dots, q_{s0}} \right)$ — условная плотность вероятности того, что координата q_j принимает свое критическое значение $q_j = q_{j0}$, при условии, что остальные координаты имели бы соответствующие значения $q_{10}, q_{20}, \dots, q_{(j-1)0}, q_j, q_{(j+1)0}, \dots, q_{s0}$.

$$W_j \left(\frac{q_{j0}}{q_{j0}, \dots, q_{s0}} \right) = \left(\frac{C_{jj}}{2\pi} \right)^{1/2} \frac{1}{\sigma_{qj}} \exp \left\{ -Y_{j0}^2 \left[1 + \sum_{i=1}^s \gamma_{ji} p_{i0}^{(j)} \right] \right\}, \quad (11)$$

где

$$Y_{j0} = \left(\frac{C_{jj}}{2} \right)^{1/2} \frac{q_{j0}}{\sigma_{qj}}; \quad \gamma_{ji} = \frac{G_{ji}}{(C_{ji}C_{ii})^{1/2}}; \quad p_{i0}^{(j)} = \left(\frac{C_{ii}}{C_{jj}} \right)^{1/2} \frac{\sigma_{qj}}{\sigma_{qi}} \frac{q_{i0}}{q_{j0}}. \quad (12)$$

Подставляя значения W_j и V_j^+ соответственно из (11) и (9) в (6), получим для константы скорости мономолекулярной реакции следующее выражение:

$$\chi_s = \frac{1}{\pi s} \sum_{j=1}^s [1 - \Phi(a_j)] (C_{jj})^{1/2} \frac{\sigma_{qj}}{\sigma_{qj}} \exp \left\{ -Y_{j0}^2 \left[1 + \sum_{i=1}^s \gamma_{ji} p_{i0}^{(j)} \right] \right\}. \quad (13)$$

Численные значения всех параметров, кроме $q_{10}, q_{20}, \dots, q_{s0}$, в выражении (13) определяются из расчета колебаний превращающейся молекулы на основе методов инфракрасной, комбинационной спектроскопии и электронографии. Не останавливаясь на методике определения $q_{10}, q_{20}, \dots, q_{s0}$, которая представляет собой самостоятельное исследование, рассмотрим некоторые качественные выводы, вытекающие из общего выражения для констант скорости.

1. При $s=1$ (т.е. когда все молекулы активируются по одной и той же координате) уравнение (13) для константы скоростей примет следующий вид:

$$\chi = \frac{1}{\pi} [1 - \Phi(a)] \frac{\sigma_q}{\sigma_q} \exp \left\{ -\frac{q_0^2}{2\sigma_q^2} \right\}, \quad (14)$$

где для простоты опущен индекс 1. При высоких температурах, т.е. при $\sigma_q \gg (\sigma_q)_0$, $\beta \rightarrow \infty$, $\alpha \rightarrow 0$, $\Phi(a) \rightarrow \frac{1}{2}$, уравнение (13) совпадает с формулой Слейтера [1,4]

$$\chi_c = \frac{1}{2\pi} \frac{\sigma_q}{\sigma_q} \exp \left\{ -\frac{q_0^2}{2\sigma_q^2} \right\}. \quad (15)$$

2. При низких температурах, т.е. при условии $\sigma_q \rightarrow (\sigma_q)_0$, $\beta \rightarrow 1$, $\alpha \rightarrow 0$, $\Phi(a) \cong 0.84$, из (14) получаем

$$\chi \cong 0.32 \chi_c. \quad (16)$$

Таким образом, при низких температурах модель Слейтера дает завышенные результаты для константы скорости мономолекулярной реакции.

3. Чтобы выяснить общую тенденцию зависимости χ_s от числа внутренних координат, привлеченных для описания данного мономолекулярного процесса, и от коэффициентов корреляции между этими координатами, предположим, что все координаты эквивалентны, т.е. удовлетворяются следующие условия:

$$q_{10}=q_{20}=\dots q_0; \quad \sigma_{q_1}=\sigma_{q_2}=\dots=\sigma_q; \quad a_1=a_2=\dots a_s=a_1 \quad (17)$$

$$\sigma_{q_1}=\sigma_{q_2}=\dots=\sigma_{q_s}=\sigma_q; \quad r_{ij}=r_{ni}=r.$$

Тогда из (13) получим для χ_s следующее выражение:

$$\chi_s = \frac{1}{\pi} \frac{\sigma_q}{\sigma_q} [1 - \Phi(a)] \left| \frac{[1 + (s-2)r]}{[(1-r)[1 + (s-1)r]} \right|^{1/2} \exp \left\{ \frac{(1-r)q_0^2}{r\sigma_q^2 [1 + (s-1)r][1 + (s-2)r]} \right\}. \quad (18)$$

Если эквивалентные координаты некоррелированы, т.е. $r=0$, то из (13) получим

$$\chi_s = \chi, \quad (19)$$

т.е. при высоких температурах и некоррелированных эквивалентных координатах можно пользоваться формулой Слейтера (15). Если координаты сильно коррелированы, т.е. $r \sim 1$, то (18) приближенно можно представить в следующем виде:

$$\chi_s = \frac{1}{\pi} \frac{\sigma_q}{\sigma_q} [1 - \Phi(a)] \left(\frac{s-1}{s} \right)^{1/2} \frac{1}{1-r} \exp \left\{ -\frac{(1-r)q_0^2}{2\sigma_q^2 s(s-1)} \right\}. \quad (20)$$

Из этого выражения видно, что предэкспоненциальный множитель в зависимости от r не ограничен сверху, так как при $r \rightarrow 1$ $\chi_s \rightarrow \infty$. Это означает, что комплексы не могут долго существовать, они почти мгновенно разлагаются. Чтобы выяснить зависимость χ_s от числа координат определим отношение

$$\lambda_s = \frac{\chi_{s+1}}{\chi_s}. \quad (21)$$

Из (20) следует, что при $s \gg 1$ $\lambda_s \rightarrow 1$, т.е. для каждой r существует такой номер $s \gg 1$, что прибавление к этому числу дополнительных координат χ_s уже не зависит от s .

Наконец, при высоких температурах, т.е. если удовлетворяется условие $a_j \rightarrow 0$ ($j=1, 2, \dots, s$), из (13) получаем

$$\chi_s = \frac{1}{2\pi s} \sum_{j=1}^s (C_{jj})^{1/2} \frac{\sigma_{qj}}{\sigma_{qj}} \exp \left\{ -Y_{j0}^2 \left[1 + \sum_{l=1}^s \gamma_{jl} p_{l0}^{(j)} \right]^2 \right\}, \quad (22)$$

что совпадает с результатом, полученным в работе [5].

Таким образом, можно утверждать, что через множители $2[1 - \Phi(a_j)]$ ($j=1, 2, \dots, s$) учитывается явный вклад туннельных переходов по каждой координате в константу скорости мономолекулярной реакции.

ЛИТЕРАТУРА

1. N. S. Slater. Theory of unimolecular reactions. N. Y., 1959.
2. Е. Е. Никитин. Теория элементарных атомно-молекулярных процессов в газах. «Химия». 1970.
3. П. Робинсон, К. Холбрук. Мономолекулярные реакции. М., Мир, 1975.
4. L. S. Mayants. J. of Physical Chemistry, **38**, 623 (1964).
5. Г. М. Чплахян, В. М. Рощупкин, Дж. С. Сафразбеян. Ученые записки ЕГУ, **1**, 32 (1974).
6. Г. М. Чплахян, В. М. Рощупкин, Г. Г. Аракелян. Ученые записки ЕГУ, **1**, 130 (1976).
7. Г. М. Чплахян, Г. Е. Мкртчян, А. В. Джамбарцян. Ученые записки ЕГУ, **3**, 174 (1990).

ԹՈՒՆԵԼԱՅԻՆ ԱՆՑՈՒՄՆԵՐԻ ՀԱՇՎԱՌՈՒՄԸ ՄՈՆՈՄՈԼԵԿՈՒԼԱՐ ՌԵԱԿՑԻԱՆԵՐԻ ՏԵՍՈՒԹՅԱՆ ՄԵՋ

Հ. Մ. ՉՓԼԱԽՅԱՆ, Դ. Մ. ՄԻՆԱՍՅԱՆ, Գ. Ա. ԷԼՈՅԱՆ, Կ. Կ. ՊԵՏՐՈՍՅԱՆ

Աշխատանքում տրված է մոնոմոլեկուլյար ռեակցիայի արագության հաստատունի հաշվման մեթոդ, որում հաշվի են առնված թունելային անցումները: Ցույց է տրված, որ ստացված արագացումները համընկնում է Սլեյթերի արդյունքի հետ ռեակցիայի ճանապարհի մեկ կոորդինատի դեպքում և բարձր ջերմաստիճաններում:

ACCOUNT OF TUNNELLINGS IN THEORY OF MONOMOLECULAR REACTIONS

H. M. CHPLAKHIAN, D. M. MINASIAN, G. A. ELOYAN, K. K. PETROSIAN

A technique of the calculation of velocity constants of monomolecular reactions with account of tunnellings is given in the paper. It is shown that the expression obtained coincides with the Slater formula at high temperatures and one coordinate of the reaction path. It is also shown that at low temperatures the Slater model yields overvalued results.

К МОЛЕКУЛЯРНОЙ ТЕОРИИ ВРАЩАТЕЛЬНОЙ ВЯЗКОСТИ
НЕМАТИЧЕСКИХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВА. Ц. САРКИСЯН, Л. С. БЕЖАНОВА, С. М. ЯИЛОЯН, Э. Б. АБРАМЯН,
Х. В. КОТАНДЖЯН, А. П. АНТОНЯН

Институт прикладных проблем физики НАН Армении

(Поступила в редакцию 26 октября 1996 г.)

Проведен теоретический расчет коэффициента вращательной вязкости нематических жидких кристаллов с учетом строения и дальнего ориентационного порядка молекул жидкого кристалла.

Одной из важнейших характеристик нематических жидких кристаллов (НЖК)—вращательной вязкости—посвящено большое количество экспериментальных работ. Различными способами измерен коэффициент вращательной вязкости γ_1 самых разнообразных химических соединений в НЖК фазе. Однако удовлетворительная молекулярная теория вращательной вязкости в НЖК фазе пока еще не построена. Наиболее основательно этот вопрос рассмотрен в [1], где межмолекулярное взаимодействие описывается потенциалом Майера-Заупе и для γ_1 получено выражение

$$\gamma_1 = T^{1/2} \cdot S^2 \exp\left(\frac{\epsilon S}{kT} + \frac{\theta S}{T - T_0}\right), \quad (1)$$

где S —степень упорядоченности, ϵS —высота потенциала Майера-Заупе, θ и T_0 —параметры вещества. Сделав некоторые упрощающие предположения, в [1] окончательно получено

$$\gamma_1 = AS^2 \exp\left(\frac{E}{kT}\right), \quad (2)$$

где A —некоторая комбинация материальных параметров НЖК, E —энергия активации вращения. Однако в теории вращательной вязкости использование среднего поля Майера-Заупе является грубым приближением.

Действительно, для смесей азоксисоединений во всем нематическом интервале γ_1 хорошо описывается формулой [2, 3]

$$\gamma_1 \sim S \exp\left(\frac{E}{kT}\right), \quad (3)$$

т.е. $\gamma_1 \sim S$, а не S^2 , как это следует из [1], хотя для другого класса соединений $\gamma_1 \sim S^2$.

Эти и ряд других факторов, подробно разобранных в [3], указывают на необходимость более корректного подхода к потенциалу межмолекулярного взаимодействия для расчета γ_1 в НЖК.

В настоящей работе проведен расчет γ_1 с учетом структуры молекул и дальнего ориентационного порядка НЖК. Для этого расчета выберем такую декартовую систему отсчета, ось z которой параллельна направлению директора НЖК.

В этой системе координат рассмотрим произвольную молекулу, центр тяжести которой находится в точке, определяемой радиус-вектором R . Жидкокристаллическую среду мысленно разделим на две части, одну из которой составляет выбранная нами молекула (в дальнейшем ее будем называть центральной молекулой) и ее ближайшие соседние молекулы. Ближайшими считаем те, которые «соприкасаются» с центральной молекулой (первая координационная сфера), а также молекулы, которые «соприкасаются» с молекулами первого слоя. Вторую часть НЖК среды составляют все остальные молекулы.

Общую энергию межмолекулярных взаимодействий вычислим как сумму парных взаимодействий центральной молекулы с первой частью НЖК среды отдельно и с молекулами второй части отдельно. Для расчета энергии парных взаимодействий допустим, что молекулы в НЖК среде могут принимать ориентации, которые удобно характеризовать единичными векторами m_R , имеющими компоненты $m_R = (\sin\theta_R \cos\varphi_R, \sin\theta_R \sin\varphi_R, \cos\theta_R)$, где R — радиус-вектор центра тяжести молекулы, θ_R, φ_R — угловые координаты в сферической системе координат.

Пусть энергия парного взаимодействия центральной молекулы с ближайшим соседом с центром тяжести в точке R'_i есть $U_{mm'}(R-R'_i)$. Тогда, в соответствии с результатами [4,5] конфигурационный гамильтониан парных взаимодействий можно записать в виде

$$H = \frac{1}{2} \bar{c} \sum_{R'_i} \int U_{mm'}(R-R'_i) F_{m'}(R'_i) d\Omega_{m'} + U, \quad (4)$$

где $F_m(R)$ — функция распределения, $\bar{c}$ — средняя плотность молекул, U — энергия парного взаимодействия центральной молекулы со всеми молекулами второй части НЖК среды, а для среднего поля, действующего на молекулу в состоянии (R, m) , имеем

$$\Phi_m(R) = \bar{c} \sum_{R'_i} \int U_{mm'}(R-R'_i) F_{m'}(R'_i) d\Omega_{m'} + U. \quad (5)$$

$U_{mm'}$ вычислим методом атом-атом потенциалов с помощью выражений [6,7]

$$U_{mm'}(R-R'_i) = \sum_{m'}^N f_{m'}(r_{ij}), \quad (6)$$

$$f_{m'}(r_{ij}) = -A r_{ij}^{-6} + B r_{ij}^{-12}, \quad (7)$$

где N — число атомов в молекуле НЖК, r_{ij} — расстояние между i атомом молекулы, центр тяжести которой находится в точке R'_i , и j

атомом центральной молекулы. A и B —постоянные, зависящие от сорта взаимодействующих атомов ($C...C$, $C...H$, $O...N$ и т. д.).

Вероятность ориентации молекулы НЖК в телесном угле $d\Omega = d\varphi d\psi d\theta$ вблизи соответствующих углов Эйлера (φ, ψ, θ) относительно лабораторной системы координат (x, y, z) характеризуется одночастичной функцией распределения $F(\varphi, \psi, \theta)$. Эта функция вследствие симметрии молекул и мезофазы зависит лишь от угла θ и может быть представлена в виде разложения в ряд по четным полиномам Лежандра $P_n(\cos\theta)$ [8]:

$$F(\theta) = \sum_n \frac{2n+1}{2} \langle P_n(\cos\theta) \rangle P_n(\cos\theta), \quad (8)$$

где коэффициент ряда определяется выражением

$$\langle P_n(\cos\theta) \rangle = \int_0^\pi P_n(\cos\theta) F(\theta) \sin\theta d\theta, \quad (9)$$

а усреднение ведется по всему ансамблю.

Ограничиваясь первыми двумя членами разложения (8), для функции распределения получим

$$F(\theta) = \frac{1}{2} P_0(\cos\theta) + \frac{5}{3} S P_2(\cos\theta), \quad (10)$$

$$S = \frac{1}{2} \langle 3\cos^2\theta - 1 \rangle.$$

Расчет энергии U . Так как во второй части НЖК среды центр тяжести ближайшей молекулы от центральной молекулы находится на расстоянии не менее 10–15 Å, то для вычисления U нет необходимости пользоваться выражениями (6), (7), поскольку на таких больших расстояниях строение молекул НЖК несущественно влияет на величину энергии их парного взаимодействия с центральной молекулой. Исходя из этого, в дальнейшем молекулы представим в виде эллипсоидов вращения. Энергия парного взаимодействия эллипсоидов вращения вычисляется с помощью выражений [9]

$$v_{ij} = \frac{4\epsilon_0 \epsilon(\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j)}{\sigma^2(\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j, \mathbf{r})} \left\{ \left| \frac{\sigma_\perp \sigma(\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j, \mathbf{r})}{r} \right|^2 - \left| \frac{\sigma_\perp \sigma(\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j, \mathbf{r})}{r} \right|^0 \right\}, \quad (11)$$

$$\epsilon(\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j) = [1 - \chi^2(\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j)^2]^{-1/2}, \quad (12)$$

$$\sigma(\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j, \mathbf{r}) = \left\{ 1 - \frac{1}{2} \chi \left[\frac{(\mathbf{r}\mathbf{u}_i + \mathbf{r}\mathbf{u}_j)^2}{1 + \chi(\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j)} + \frac{(\mathbf{r}\mathbf{u}_i - \mathbf{r}\mathbf{u}_j)^2}{1 - \chi(\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j)} \right] \right\}^{-1/2}, \quad (13)$$

$$\chi = \frac{\sigma_\parallel^2 - \sigma_\perp^2}{\sigma_\parallel^2 + \sigma_\perp^2}, \quad (14)$$

где $\sigma_\parallel$ и $\sigma_\perp$ —длины осей эллипсоида, r —расстояние между частицами, $\mathbf{u}_i$ и $\mathbf{u}_j$ —единичные векторы, направленные вдоль длинных осей эллипсоидов, $\mathbf{r}$ —единичный вектор, направленный вдоль линии, соединя-

ющей центры эллипсоидов, ε_0 —силовой параметр потенциала, χ —анизотропный параметр.

Вычисление v_{ij} сводится к расчету ε и σ с помощью (12), (13). Проведем его для трех частных случаев.

1. Если $\mathbf{p}_0 \parallel \mathbf{u}_i \parallel \mathbf{u}_j$, а $\mathbf{r}$ перпендикулярен этим векторам, то $\varepsilon = (1 - \chi^2)^{-1/2}$, $\sigma = 1$ ($\mathbf{p}_0$ —единичный вектор, указывающий направление дивектора).

2. Если $\mathbf{p}_0 \parallel \mathbf{u}_i \parallel \mathbf{u}_j$, а $\mathbf{r} \parallel \mathbf{u}_i$, то $\varepsilon = 1$, $\sigma = (1 - \chi)^{-1/2}$.

3. Если $\mathbf{p}_0 \parallel \mathbf{u}_i \parallel \mathbf{u}_j$, а $\mathbf{r}$ параллелен этим векторам, то $\varepsilon = (1 - \chi^2)^{-1/2}$, $\sigma = [(1 - \chi)/(1 + \chi)]^{1/2}$.

Исходя из симметрии НЖК фазы, эллипсоидов вращения и больших расстояний между рассматриваемыми парами эллипсоидов, можно считать, что в потенциале v_{ij} угловые зависимости играют незначительную роль. При таком допущении вместо ε и σ возьмем их средние значения ($\bar{\varepsilon}$ и $\bar{\sigma}$) вышеперечисленных трех случаев с соответствующими статистическими весами. Очевидно, что статистический вес третьего случая ($\mathbf{u}_i \parallel \mathbf{u}_j \parallel \mathbf{r}$) ничтожно мал по сравнению со статистическими весами первых двух случаев и этим случаем можно пренебречь. Тогда для $\bar{\varepsilon}$ и $\bar{\sigma}$ получим

$$\bar{\varepsilon} = \frac{1}{2} \left\{ [1 + (1 - \chi^2)^{-1/2}] - 5S \left[\frac{1}{3} - (1 - \chi^2)^{-1/2} \right] \right\}, \quad (15)$$

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{2} \left\{ [1 + (1 - \chi)^{-1/2}] + 5S \left[1 - \frac{1}{3} (1 - \chi)^{-1/2} \right] \right\}, \quad (16)$$

где S —степень упорядоченности НЖК.

С помощью $\bar{\varepsilon}$ и $\bar{\sigma}$ v_{ij} можно записать в виде

$$v_{ij} = \frac{4\varepsilon_0 \bar{\varepsilon}}{\bar{\sigma}^2} \left[\left(\frac{\sigma_{\perp} \bar{\sigma}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{\perp} \bar{\sigma}}{r} \right)^6 \right]. \quad (17)$$

Общая энергия межмолекулярных взаимодействий второй части НЖК с центральной молекулой определяется выражением

$$u = -4\pi \bar{c} \int_{r_0}^{\infty} r^2 v_{ij} dr, \quad (18)$$

где r_0 —радиус шара, объем которого равен объему первой части НЖК.

Подставляя (17) в (18) и проведя интегрирование, получим

$$u = \frac{19}{5} \pi \bar{c}^4 \bar{\sigma}^6 \varepsilon_0 \bar{\varepsilon} r_0^{-5}. \quad (19)$$

Из (5) и (19) для $\Phi_m(R)$ следует

$$\Phi_m(R) = \bar{c}(P + Q), \quad (20)$$

где

$$P = \sum_{R'_1} \int \sum_{m'} f_m(r_{ij}) F_m(R'_1) d\Omega_{m'}, \quad (21)$$

$$Q = \frac{16}{5} \pi \bar{\epsilon}^3 \sigma^3 \perp \epsilon_0 \bar{\epsilon} r_0^{-5}. \quad (22)$$

Из этого выражения следует, что энергия среднего поля молекулы имеет минимум при $\theta=0$ или $\theta=\pi$ и максимум при $\theta=\frac{\pi}{2}$. В таком молекулярном поле, согласно [9],

$$\gamma_1 = \frac{k}{\pi^2} \frac{T}{V^a} \cdot \frac{1}{v_0}, \quad (23)$$

где v_0 —характеристическая частота реориентационного прыжка молекулы вокруг директора на π радиан между двумя минимумами потенциала межмолекулярного среднего поля, V^a —объем каждой частицы, необходимый для прыжка. Если V_N —объем каждой молекулы в НЖК фазе, то, согласно [1],

$$\frac{V^a - V_N}{V^a} = -\beta \Delta P, \quad (24)$$

где β —коэффициент всестороннего сжатия НЖК, ΔP —изменение внутреннего давления, необходимого для расширения объема.

Имея в виду, что $c = \frac{1}{V_N}$, для ΔP получим

$$\Delta P = - \frac{\partial \Phi_m}{\partial V_N} = \frac{1}{V_N^2} (P + Q). \quad (25)$$

Тогда

$$\frac{V^a - V_N}{V^a} = \frac{\beta(P+Q)}{V_N^2}. \quad (26)$$

Частота реориентации v_0 определяется выражением [1]

$$v_0 = \frac{kT z_a}{h z_g} \cdot \frac{I_2^a}{I_2^g} \cdot \left[\frac{I_1^a}{I_1^g} \cdot \frac{h^2}{2\pi^2 I_2^a kT} \right]^{1/2} \exp\left(-\frac{\Delta\Sigma}{R}\right), \quad (27)$$

где z_a и z_g —статистические суммы всех степеней свободы молекул в активированном и основном состоянии соответственно, кроме вращательных статистических сумм (молекула считается в активированном состоянии при $\theta=\pi/2$ и в основном состоянии при $\theta=0$), I_i —главные значения моментов инерции молекул, h —постоянная Планка, $\Delta\Sigma$ —разность энтропии между активированным и основным состояниями.

С помощью (26) и (27) из (23) следует

$$\gamma_1 = \frac{V_N^2 - \beta(P+Q)}{\pi^2 V_N^3} \cdot \frac{z_g}{z_a} \frac{I_2^g}{I_2^a} \left[\frac{I_1^g}{I_1^a} \cdot 2\pi^2 I_2^a kT \right]^{1/2} \exp\left(\frac{\Delta\Sigma}{k}\right). \quad (28)$$

Далее в вычислениях $\exp\left(\frac{\Delta\Sigma}{k}\right)$, проведенных в [1], заменяя по-

тенциал. Майера-Зауле потенциалом (20) и допустив, что $\frac{z_g}{z_a} \frac{I_g^g}{I_a^a} =$
 $= \frac{I_g^g}{I_a^a} = 1$, для γ_1 получим

$$\gamma_1 = \frac{V_N^2 - 3(P+Q)}{\pi^2 V_N^3} (2\pi^2 I_2^a kT)^{1/2} e^{-\gamma} \cdot \exp \left[\frac{\Phi_m^g - \Phi_m^a}{kT} - \gamma \frac{3(P+Q)}{V_N^2} \cdot \frac{V^a}{a V_0(T-T_0)} \right], \quad (29)$$

где $-0,5 \leq \gamma \leq 1,0$ есть параметр для вычисления свободного объема, $V_0 = V_N(T_0)$, а T_0 — температура, при которой свободный объем недостаточно большой, z — разность коэффициентов термического расширения нематической и твердокристаллической фаз (V_0 определяется выражением $V_N(T) - V_0 \approx z V_0(T - T_0)$).

В случае $T - T_0 = 10 \text{ K}$ вычисленные с помощью (29) значения γ_1 для трех НЖК из различных классов химических соединений сопоставлены с экспериментальными данными для этих веществ. Величины моментов инерции, входящих в (29), для исследуемых объектов вычислены нами. Остальные параметры взяты из [1]. Результаты вычислений и соответствующие экспериментальные величины приведены в таблице.

Таблица. Величины момента инерции I_2^a и коэффициента вращательной вязкости γ_1 для некоторых НЖК

N	Вещество	$I_2^a, 10^{-38}$ г · см ²	$\gamma_1, \text{сП}$	
			теорет.	эксп.
1	Цианфениловый эфир	16,319	14,2	13,9[10]
2	гептилбензойной кислоты	9,288	76,5	77,3[11]
3	4-циан-4'-н-децил-бифенил			
	4-н-бутил-4'-н-гептаноил-оксиназоксibenзол	7,788	69,6	69,4[1]

Как видно из приведенной таблицы, теоретические значения γ_1 в случае параметра $\gamma = 1,0$ достаточно хорошо совпадают с литературными данными.

Работа выполнена в рамках темы 96—711, финансируемой из государственных централизованных источников РА.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. C. Dlogo, A. F. Martins. Mol. Cryst. Liq. Cryst., 66, 133 (1981).
2. J. Prost, G. Sigaud, B. Regaya. Phys. Lett., 37, L341 (1976).
3. М. Ф. Гребенкин, А. В. Ивашенко. Жидкокристаллические материалы. М., «Химия», 1989.
4. Д. А. Бадалян, А. Г. Хачатурян, А. И. Китайгородский. Кристаллография, 14, 404 (1969).

5. А. Г. Хачатурян, Д. А. Бадалян. Кристаллография, 22, 677 (1977).
6. А. И. Китайгородский. Молекулярные кристаллы. М., «Наука», 1971.
7. В. Г. Дашевский. Конформационный анализ органических молекул. М., «Химия», 1982.
8. А. З. Абдулин, В. С. Безбородов, А. А. Минько, В. С. Рачкевич. Текстурообразование и структурная упорядоченность в жидких кристаллах. Минск, изд. «Университетское», 1987.
9. A. Ts. Sarkissyan, S. M. Yalloyan. Mol. Cryst. Liq. Cryst., 241, 31 (1994).
10. P. R. Greber, M. Schadt. Z. Naturforsch., A37, 179 (1982).
11. I. T. S. Sledler, A. I. Hyde, R. A. Pethrick, F. M. Leslie. Mol. Cryst. Liq. Cryst., 190, 255 (1983).

**ՆԵՄԱՏԻԿ Հեղուկի ԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐԻ ՊՏՏՈՂԱԿԱՆ ՄԱՍՈՒՑԻԿՈՒԹՅԱՆ
ՄՈԼԵԿՈՒԼԱՅԻՆ ՏԵՍՈՒԹՅԱՆ ՄԱՍԻՆ**

Ա. Յ. ՍԱՐԳՍՅԱՆ, Լ. Ս. ԲԵԺԱՆՈՎԱ, Ս. Մ. ՅԱԼՈՅԱՆ, Է. Բ. ԱԲՐԱՀԱՄՅԱՆ,
Ք. Վ. ԿՈՏԱՆԴԻԱՆ, Ա. Պ. ԱՆՏՈՆՅԱՆ

Հաշվի առնելով հեղուկ բյուրեղների մոլեկուլների կառուցվածքը և հեռավոր օրինադրման կարգը կատարվել է նեմատիկ հեղուկ բյուրեղների պտտողական մածուցիկության գործակցի տեսական հաշվարկ:

**ON THE MOLECULAR THEORY OF THE ROTATIONAL VISCOSITY
OF NEMATIC LIQUID CRYSTALS**

A. Ts. SARKISSYAN, L. S. BEZHANOVA, S. M. YAILOYAN, E. B. ABRAHAMYAN,
Kh. V. KOTANDGIAN, A. P. ANTONYAN

Taking into account the structure and far-orientation order of molecules of liquid crystals, the rotational viscosity coefficient of nematic liquid crystals has been calculated theoretically.

УДК 537.312.62

К ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ ПОВЕРХНОСТНОГО СВЧ ИМПЕДАНСА
ВТСП ПЛЕНОК К ОПТИЧЕСКОМУ ВОЗБУЖДЕНИЮ

В. М. АРУТЮНЯН, В. В. БУНИАТЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 17 декабря 1996г.)

В работе изучено влияние модулированного по интенсивности излучения на составляющие поверхностного СВЧ импеданса ВТСП пленок.

Открытие высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) и развитие технологии их получения в виде пленок позволяет реализовать чувствительные СВЧ устройства миллиметрового и субмиллиметрового диапазонов волн, работающие при азотном уровне температур (см., например, [1, 2]). Заметный интерес проявляется в последние годы к изучению свойств сверхпроводника при воздействии на него лучистой энергии (лазерного излучения, инфракрасного возбуждения, звука и т. д.). Дополнительное к тепловому разрушение куперовских пар в обычных сверхпроводниковых тонких пленках под лазерным пучком исследовалось еще в начале 70-х годов (см., например, [3]), в результате чего был сделан вывод, что образование дополнительных неспаренных электронов уменьшает ширину щели, но само сверхпроводящее состояние не разрушается вплоть до вполне определенных концентраций дополнительных электронов. Вышеуказанное явление взаимодействия фотонов с энергетической щелью в ВТСП пленках и распада пары сверхпроводящих электронов может быть использовано для обнаружения слабых сигналов очень коротких волн, т. е. для создания высокочувствительных оптических детекторов. Реализованная на практике высокая чувствительность ВТСП пленок из YBaCuO_x к оптическому возбуждению (см., например, [4]) открывает возможность реализации также оптических переключателей [5], смесителей [6], линий задержек [7] и других оптически управляемых СВЧ приборов.

Целью настоящей работы является анализ зависимости фоточувствительности составляющей СВЧ-поверхностного импеданса ВТСП пленок при воздействии на них модулированного по интенсивности оптического возбуждения. В этой статье, в отличие от цитируемых выше работ, под оптическим возбуждением понимается облучение пленки модулированным по интенсивности инфракрасным или видимым излучением. Ясно, что если на ВТСП пленку падает модулированный оптический сигнал $\Phi = \Phi_0(1 + \sin \omega_s t)$, где Φ_0 — интенсивность излучения, ω_s — частота, t — время, то активная и реактивная

составляющие поверхностного импеданса модулируются по закону «накачки».

Примем, что при поглощении ВТСП пленкой оптического излучения с интенсивностью Φ имеет место некоторый переборс электронов через сверхпроводящую шель, при этом температура пленки существенно не меняется, а общая концентрация электронов в рамках двухжидкостной модели $n = n_s + n_N = n_{s\Phi} + n_{N\Phi}$ и сверхпроводящее состояние сохраняются. Тогда концентрация электронов в сверхпроводящем состоянии n_s уменьшается, а концентрация обычных электронов n_N увеличивается на одну и ту же величину Δn_Φ .

Имеем

$$n_{R\Phi} = n_s - \Delta n_\Phi = n_{sT}(1 - f_1), \quad n_{N\Phi} = n_N + \Delta n_\Phi = n_{NT}(1 + f_1), \quad (1)$$

где $\Delta n_\Phi \approx C\Phi_0(1 + \sin\omega_s t) = n_{NT}f_1 = n_{sT}f_2$, $f_1 = f_1^0\Phi_0$, $f_2 = f_2^0\Phi_0$, C — произведение коэффициента поглощения света на квантовый выход и среднее время существования возбужденных электронов; смысл f_1 и f_2 ясен из (1).

Известно, что в ВТСП пленках при $d \ll \lambda_L$, где d — толщина пленки, а λ_L — лондоновская глубина проникновения, активная и реактивная составляющие поверхностного импеданса, полученные на основе двухжидкостной модели (см., например, [2]), при $t_c = T/T_c < 1$ выражаются как

$$R_s(t_0) = (\omega\mu_0)^2 \frac{\lambda_L^2(t_0)}{d} \sigma_N(t_0), \quad X_s(t_0) = \omega\mu_0 \frac{\lambda_L(t_0)}{d}, \quad (2)$$

где

$$\lambda_L^2(t_0) = \frac{m_s}{n_s q^2 \tau_N}, \quad \sigma_N(t_0) = \frac{n_N q^2 \tau_N}{m_N}, \quad (3)$$

T — температура образца; T_c — критическая температура; ω — частота СВЧ поля; μ_0 — магнитная постоянная вакуума; τ_N — проводимость, связанная с нормальным состоянием; m_s, m_N, n_s, n_N — эффективные массы и концентрации электронов в сверхпроводящем и нормальном (несверхпроводящем) состояниях, соответственно; τ_N — время жизни нормальных электронов; q — заряд электрона. Тогда для составляющих импеданса $R_{s\Phi}(t_0)$ и $X_{s\Phi}(t_0)$ из (2) получим:

$$R_{s\Phi} \approx R_s(t_0)\{1 + 2f_2 + f_1 + 2f_1 f_2\}, \quad X_{s\Phi} \approx X_s(t_0)\{1 + f_2\}. \quad (4)$$

Введем понятие оптической чувствительности составляющих поверхностного импеданса $S_{R\Phi}$ и $S_{X\Phi}$. Для них из (4) нетрудно получить

$$S_{R\Phi} = \frac{1}{R_s(t_0)} \frac{\partial R_{s\Phi}(t_0)}{\partial \Phi_0} = 2f_2^0 + f_1^0 + 4f_1^0 f_2^0, \quad S_{X\Phi} = \frac{1}{X_s(t_0)} \frac{\partial X_{s\Phi}(t_0)}{\partial \Phi_0} = f_2^0. \quad (5)$$

Очевидно, что темп роста $S_{R\Phi}$ с интенсивностью излучения (оптическая чувствительность по R) больше, чем чувствительность $S_{X\Phi}$ по X . Аналогично, для массивного ВТСП материала, где

$$R_{SM}(t_0) = \frac{1}{2} (\omega \mu_0)^2 \epsilon_L^2(t_0) \epsilon_A(t_0), \quad X_{SM}(t_0) = \omega \mu_0 \epsilon_L(t_0), \quad (6)$$

ретрудно получить такое же соотношение между чувствительностями, так как

$$R_{S\Phi} \approx R_S(t_0) \left(1 + f_1 + \frac{3}{2} f_1 f_2 \right), \quad X_{S\Phi} \approx X_S(t_0) \left(1 + \frac{f_2}{2} \right), \quad (7)$$

а S_{RM} и S_{XM} равны

$$S_{RM} \approx f_1^0 (1 + 3f_2), \quad S_{XM} \approx \frac{1}{2} f_2^0. \quad (8)$$

Отметим что, вышеуказанный более быстрый рост R_S с освещением по сравнению с ростом X_S наблюдался в [4] для $YBaCuO_x$ пленок и, по-видимому, носит общий характер в силу очевидных неравенств $S_{R\Phi} > S_{X\Phi}$ как для тонких пленок, так и для массивных образцов.

Настоящая работа выполнена в рамках гранта INTAS—94-3912.

ЛИТЕРАТУРА

1. О. Г. Вендик и др. СФХТ, 3, 2133 (1990).
2. O. Vendik et al. Models of HTSC Transmission Lines as Applied for CAD of Microwave Integrated Circuits. Rep. № 9 ISSN 1103—4599, ISRN CTH-MVT-R-9-SE, 1994.
3. L. R. Testardi. Phys. Rev. B4, 2189 (1971), C. S. Owen and D. F. Scalapino. Phys. Rev. Lett., 28, 1559 (1972), W. H. Parker and W. D. Williams, ibid., 29, 924 (1972).
4. E. Carlsson, S. Gevorgian, et al. Proc. IEEE, MTT-S Topical Meeting on Optical Microwave Interaction, 195 (1994).
5. D. Gupta et al. IEEE Trans. Appl. Supercond., 3, 2895 (1993).
6. E. K. Track, R. E. Drake, G. K. G. Hobenwarterm. IEEE Trans. Appl. Supercond., 3, 2899 (1993).
7. D. Zhang, D. V. Plant, H. Fetterman. Appl. Phys. Lett., 58, 1560 (1991).

ՔՋԳԹ ԳՔԶ ՄԱԿԵՐԵՎՈՒԹԱՅԻՆ ԻՄՊԵԴԱՆՍԻ ԲԱՂԱԴՐԻԶՆԵՐԻ
ԶԳԱՅՈՒՆՈՒԹՅՈՒՆԸ ՕՊՏԻԿԱԿԱՆ ԳՐԳՈՄԱՆ ՆԿԱՏՄԱՄԲ

Վ. Մ. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Վ. Վ. ԲՈՒՆԻԱՏԻԱՆ

Աշխատանքում տեսականորեն հետազոտված է ՔՋԳԹ ԳՔԶ մակերևութային իմպեդանսի բաղադրիչների զգայունությունը ինտենսիվության մոդուլացված օպտիկական ազդանշանի նկատմամբ:

ON THE SENSITIVITY OF THE SURFACE MICROWAVE IMPEDANCE OF HTSC FILMS TO THE OPTICAL EXCITATION

V. M. AROUTIOUNIAN, V. V. BOUNIATIAN

The theoretical analysis of the sensitivity of the surface impedance of superconducting films to the optical illumination is carried out.

ПОЛЕ ТЕМПЕРАТУР В АНИЗОТРОПНОЙ СРЕДЕ ПРИ
УСТАНОВИВШЕМСЯ ТЕМПЕРАТУРНОМ ГРАДИЕНТЕ

А. М. ЕГИАЗАРЯН, Х. В. КОТАНДЖЯН, Ю. Н. ГАЗАРЯН

Институт прикладных проблем физики НАН Армении

(Поступила в редакцию 4 октября 1996г.)

Аналитически решена задача определения температурного поля в кристалле кварца при установившемся температурном градиенте. Определены изотермические поверхности в кристалле кварца и функции смещения атомов из положения равновесия.

Определение температурного поля в анизотропных средах является самостоятельной задачей, важной для объяснения результатов многих теоретических и экспериментальных исследований. Важность ее особенно проявляется в связи с теплообменом поверхностей кристалла со средой. Нахождение распределения температуры в такой среде в общем случае сводится к решению задачи для температурного поля изотропной среды при соответствующем выборе начала отсчета и направления координатных осей. В случае установившегося температурного градиента задача сводится к решению уравнений в частных производных второго порядка с соответствующими граничными условиями. Для тела, имеющего форму прямоугольного параллелепипеда, решение этого уравнения можно записать аналитически.

Целью настоящей работы является определение изотермических поверхностей в кристалле кварца и определение функции смещения атомов из положения равновесия.

Стороны прямоугольного параллелепипеда, в виде которого вырезан кристалл кварца, обозначим через $2A$, $2B$, C . Систему координат выберем так, чтобы декартовы координаты атомов удовлетворяли условиям

$$-A < x < A, \quad -B < y < B, \quad 0 < z < C.$$

Пусть грань $z=0$ поддерживается при температуре t_1 , а грань $z=C$ при температуре t_2 . Предположим, что на всех остальных гранях происходит свободный теплообмен со средой температуры t_2 . Если обозначить коэффициенты теплопроводности кристалла вдоль осей Ox , Oy , Oz через χ_1 , χ_2 и χ_3 соответственно, то в случае установившегося температурного градиента уравнение теплопроводности будет иметь вид [1]:

$$\chi_1 \frac{\partial^2 t}{\partial x^2} + \chi_2 \frac{\partial^2 t}{\partial y^2} + \chi_3 \frac{\partial^2 t}{\partial z^2} = 0. \quad (1)$$

Для кристалла кварца имеет место соотношение $\chi_1 = \chi_2 = \chi$ и решение уравнения (1) должно удовлетворять граничным условиям:

$$\frac{\partial t}{\partial y} - h(t - t_2) = 0 \quad \text{при } y = B,$$

$$\frac{\partial t}{\partial x} - h(t - t_2) = 0 \quad \text{при } x = A,$$
(2)

где $h = \frac{H}{\lambda}$, H — коэффициент теплоотдачи кристалл-среда (воздух).

Решение

$$\frac{\text{sh}[l(C-z)]}{\text{sh}(lC)} \cos(a_r y) \cos(\beta_s x)$$
(3)

удовлетворяет уравнению (1), если

$$l^2 = a_r^2 + \beta_s^2,$$
(4)

и удовлетворяет граничным условиям (2), если параметры a_r и β_s являются решениями трансцендентных уравнений

$$a_r \text{tg} a_r B = h, \quad \beta_s \text{tg} \beta_s A = h.$$

При этих условиях решением задачи является выражение

$$t(x, y, z) = t_2 - \sum_{r=1}^{\infty} \sum_{s=1}^{\infty} \frac{4(t_2 - t_1) h^2 \text{sh}[l(C-z)] \cos(a_r y) \cos(\beta_s x)}{\text{sh}(lC) \cos(a_r B) \cos(\beta_s A) [(a_r^2 + h^2)B + h] [(\beta_s^2 + h^2)A + h]}.$$
(5)

Ряд (5) является быстро сходящимся, что позволяет определить изометрические поверхности $t(x, y, z) = \text{const}$.

Для анизотропных кристаллов вектор $u(x, y, z)$ смещения атомов из положения равновесия при стационарном тепловом процессе описывается коэффициентом линейного теплового расширения, который является тензором второго ранга a_{ij} . Если координатные оси выбраны вышеуказанным способом, то этот тензор принимает диагональный вид:

$$a_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{при } i \neq j, \\ a_i & \text{при } i = j, \end{cases}$$

где a_i — коэффициент линейного расширения вдоль соответствующих координатных осей. Рентгеновский метод — это основной метод изучения искривления атомных плоскостей кристаллов при температурном градиенте. Но при решении динамических задач рентгеновской оптики [2] функция смещения приблизительно аппроксимируется как квадратичная функция. Это приближение допускает аналитические решения некоторых рентгенодифракционных задач, оправданных экспериментальными результатами [3].

С большой степенью точности можно положить, что

$$\frac{\partial u_z}{\partial x} = a_1 \frac{\partial t}{\partial x} x, \quad \frac{\partial u_z}{\partial y} = a_2 \frac{\partial t}{\partial y} y, \quad \frac{\partial u_z}{\partial z} = a_3 \frac{\partial t}{\partial z} z.$$
(6)

Можно показать, что проекция вектора смещения $u_z(x, y, z)$ имеет вид:

$$u_z(x, y, z) = \sum_{r=1}^{\infty} \sum_{s=1}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k E_{rs} \left[a_1 \beta_s^{2k+1} \frac{x^{2k+3} \operatorname{sh}[l(C-z)] \cos(a_r y)}{(2k+1)!(2k+3)} + \right. \\ \left. + a_2 a_r^{2k+1} \frac{y^{2k+3} \operatorname{sh}[l(C-z)] \cos(\beta_s x)}{(2k+1)!(2k+3)} + a_3 \operatorname{ch}(lC) \frac{z^{k+2} \cos(a_r y) \cos(\beta_s x)}{k!(k+2)} \right], \quad (7)$$

где

$$E_{rs} = \frac{4\beta_s(t_2 - t_1)h^2}{\operatorname{sh}(lC) \cos(a_r B) \cos(\beta_s A) [(a_r^2 + h^2)B + h][\beta_s^2 + h^2]A + h}.$$

Для кристалла кварца $a_1 = a_2$.

Выражение (7) позволяет определить величину искривления атомных плоскостей при установившемся температурном градиенте, что в частности, можно использовать в рентгенодифракционных исследованиях.

Авторы выражают благодарность А. Р. Мкртчяну за ценные замечания и помощь при выполнении работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Г. Карслоу, Д. Егер. Теплопроводность твердых тел. М., Наука, 1964.
2. З. Г. Пинскер. Рентгеновская кристаллооптика. М., Наука, 1982.
3. В. Л. Инденбом, В. М. Каганер. Всесоюзное совещание «Проблемы рентгеновской диагностики несовершенства кристаллов», с. 67—83, Ереван, 1985.

TEMPERATURE FIELD IN ANISOTROPIC MEDIUM IN THE PRESENCE OF A STEADY TEMPERATURE GRADIENT

A. M. YEGHIAZARIAN, Kh. V. KOTANDGIAN, Yu. N. GAZARIAN

A problem of determination of a temperature field in a quartz crystal in the presence of temperature gradient is solved analytically. Isothermic surfaces in a quartz crystal and the function of atom displacement from equilibrium state are determined.

ԱՆԻՉՈՏՐՈՊ ՄԻՋԱՎԱՅՐՈՒՄ ԶԵՐՄԱՍՏԻՃԱՆԱՅԻՆ ԴԱՇՏԸ ՀԱՍՏԱՏՎԱԾ ԶԵՐՄԱՍՏԻՃԱՆԱՅԻՆ ԳՐԱԴԻԵՆՏԻ ԴԵՊՔՈՒՄ

Ա. Մ. ԵՂԻԱԶԱՐԻԱՆ, Խ. Վ. ԿՈՏԱՆԴԳԻԱՆ, ՅՈՒ. Ն. ԳԱԶԱՐԻԱՆ

Անաիտիկորեն լուծված է կվարցի բյուրեղում շերմաստիճանային դաշտի որոշման խնդիրը, երբ հաստատված է ճերմաստիճանային գրադիենտը։ Որոշված են իզոթերմիկ մակերևույթները կվարցի բյուրեղում և ատոմների հավասարակշռության դիրքերից շեղման ֆունկցիան։

УДК 537.226

РАСЧЕТ ЗАВИСИМОСТИ ИНТЕРВАЛА ПЛАВЛЕНИЯ ГИБКОЦЕПНЫХ ПОЛИМЕРОВ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

А. М. МАШУРЯН, Г. Т. ОВАНЕСОВ, З. А. ГРИГОРЯН, К. А. ГАСПАРЯН

Научно-производственный кооператив «Франк»
Ереванское военно-авиационное летно-техническое училище
Армянский государственный инженерный университет
Санкт-Петербургский технологический институт

(Поступила в редакцию 17 декабря 1996г.)

Проведен расчет изменения степени кристалличности полимеров в интервале температур плавления в зависимости от температуры кристаллизации с учетом отличия конформационной энтропии частей макромолекул межкристаллитного слоя и макромолекул аморфных областей. Получено удовлетворительное соответствие расчетных и экспериментальных температурных зависимостей степени кристалличности. Расчетное соотношение позволяет описать изменение степени кристалличности и интервала плавления в зависимости от температуры кристаллизации.

При кристаллизации полимеров части макромолекул в виде регулярных и нерегулярных складок, проходных макромолекул и концов цепей не входят в кристаллиты и составляют аморфную фазу межкристаллитного слоя [1, 2]. Известно [3, 4], что закристаллизованные полимеры не обладают строго определенной температурой плавления. При повышении температуры в интервале плавления увеличивается содержание аморфной фазы. Рост содержания аморфной фазы при повышении температуры подтверждается исследованиями изменения степени кристалличности в процессе плавления [3, 5]. Свободная энергия плавления ламелярного кристаллита зависит не только от его структуры, но и от конформационной энтропии участков макромолекул, распределенных в пределах межкристаллитного слоя [6]. Понижение температуры кристаллизации приводит к росту дефектности кристаллической структуры и изменяет соотношение и размеры частей макромолекул межкристаллитного слоя.

Целью настоящей работы является расчет аналитической зависимости степени кристалличности от температуры в интервале плавления.

Сравнение с экспериментальными результатами проводилось на примере полиэтилена высокой плотности (ПЭВП) с индексом расплава 0,25 г/10 мин., плотностью $\rho = 0,956 \text{ г/см}^3$ и молекулярным весом $1,49 \cdot 10^5$. Плавление кристаллической структуры исследовалось на дифференциальном микрокалориметре марки «Э. Кальве-200» при скорости подогрева 2,7 град/ч. Образцы ПЭВП весом 2,5 г помещались

в цилиндрический сосуд и выдерживались при температуре 165°C в течение 45 мин до полной аморфизации. Изотермическая кристаллизация проводилась в микрокалориметре при температурах 120,65°C и 122,6°C. Степень кристалличности определялась по методике, описанной в работе [5].

Расчет аналитической зависимости степени кристалличности от температуры в интервале плавления производится с учетом отличия конформационной энтропии частей макромолекул межкристаллитного слоя и макромолекул аморфных областей. При кристаллизации изменение свободной энергии кристалла высотой l и торцевой площадью θa (θ —число отрезков макромолекул в поперечном сечении кристалла, a —эффективная площадь поперечного сечения каждого отрезка цепи) может быть представлено в виде

$$\Delta F = 2\theta a \sigma_s + GL\sqrt{\theta a} \sigma_s - \theta a l \Delta f + T \sum_{i=1}^m \Delta S_i, \quad (1)$$

где G —численная константа, зависящая от формы пластинки, σ_s , σ_t —удельные энергии боковой и торцевой поверхностей, Δf —изменение объемной свободной энергии, ΔS_i —изменение конформационной энтропии i -ого «аморфного» участка цепи, связанное с кристаллитом. Согласно модели зародышеобразования гибкоцепных полимеров, предложенной в работе [2], основной вклад в изменение конформационной энтропии вносят петлеобразно зацепленные в кристалле «аморфные» участки цепей, такие, как регулярные и нерегулярные складки. В момент образования зародыша они имеют эффективную длину L . При этих условиях

$$\sum_{i=1}^m \Delta S_i = \frac{3}{2} k \epsilon \theta \frac{l}{L-l}, \quad (2)$$

где m —числа натурального ряда, ϵ —относительное число «аморфных» петель, связанных с кристаллом, k —постоянная Больцмана. Степень кристалличности определяется, как $\alpha = \frac{l}{L}$. Условие ее равновесия запишется в виде

$$\frac{d\Delta F}{d\alpha} = GL\sqrt{\theta a} \sigma_s + \frac{3}{2} k T \epsilon \theta \frac{1}{(1-\alpha)^2} - L \theta a \Delta f = 0.$$

Из условия для изменения объемной свободной энергии $\Delta f = \Delta h_0 \left(1 - \frac{T}{T_{пл}^0}\right)$, где Δh_0 , $T_{пл}^0$ —соответственно энтальпия и температура плавления идеального кристалла, легко получить выражение, связывающее равновесную степень кристалличности с температурой:

$$\frac{1}{(1-\alpha)^2} = \frac{1}{T} \frac{\Delta h_0 - \frac{C \sigma_s}{\sqrt{\theta a}}}{\frac{3}{2} k \frac{\epsilon}{aL}} - \frac{1}{T_{пл}^0} \frac{\Delta h_0}{\frac{3}{2} k \frac{\epsilon}{aL}}. \quad (3)$$

Сравнительная оценка величин Δh_0 и $\frac{G\sigma_0}{\sqrt{6}a}$ показывает, что, начиная с небольших значений $\sqrt{6}a$, Δh_0 на два и более порядка больше, чем значение $\frac{G\sigma_0}{\sqrt{6}a}$. Пренебрегая этим членом в соотношении (3), получим

$$\frac{1}{(1-\alpha)^2} = \frac{\Delta h_0}{\frac{3}{2}k \frac{\varepsilon}{aL}} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{пл}^0} \right). \quad (4)$$

Согласно выражению (4), равновесная степень кристалличности зависит от температуры кристаллизации, структуры полимерного расплава в момент зародышеобразования (L), морфологии зародышеобразования (ε) и термодинамических параметров кристалла ($\frac{1}{T_{пл}^0}$ и a). В изометрических условиях температура кристаллизации будет полностью определять параметр $\frac{\varepsilon}{L}$ и конечную равновесную степень кристалличности ($\alpha_{кр}$):

$$\frac{1}{(1-\alpha_{кр})^2} = \frac{\Delta h_0}{\frac{3}{2}k \frac{\varepsilon}{aL}} \left(\frac{1}{T_{кр}} - \frac{1}{T_{пл}^0} \right). \quad (5)$$

По соотношению (5) и с помощью (4) можно легко получить температурную зависимость степени кристалличности (кривые плавления) для образцов, закристаллизованных при различных температурах, из соотношения

$$\frac{1}{(1-\alpha)^2} = \frac{1}{T} \frac{1}{(1-\alpha_{кр})^2 \left(\frac{1}{T_{кр}} - \frac{1}{T_{пл}^0} \right)} - \frac{1}{T_{пл}^0} \frac{1}{(1-\alpha_{кр})^2 \left(\frac{1}{T_{кр}} - \frac{1}{T_{пл}^0} \right)}. \quad (6)$$

Согласно определению, температура плавления полимера $T_{пл}^*$ — это температура, при которой исчезают последние следы кристалличности ($\alpha=0$). Используя это условие, получим

$$\frac{1}{(1-\alpha)^2} = \frac{1}{T} \frac{1 - \frac{1}{(1-\alpha_{кр})^2}}{\frac{1}{T_{пл}^*} - \frac{1}{T_{кр}}} - \frac{1}{T_{пл}^*} \frac{\frac{1}{T_{кр}} - \frac{1}{(1-\alpha_{кр})^2}}{\frac{1}{T_{пл}^*} - \frac{1}{T_{кр}}}. \quad (7)$$

Соотношение (7) позволяет установить характер изменения степени кристалличности в интервале температур плавления.

Нами установлено удовлетворительное соответствие экспериментальной и расчетной зависимостей степени кристалличности в интервале температур плавления. Соответствие экспериментальных и расчетных данных показывает возможность использования соотношения (7) для установления взаимосвязи температурного изменения степени

кристалличности и температуры кристаллизации. Отклонение экспериментальных зависимостей от расчетной на начальной стадии плавления, по-видимому, связано с отличием модельного представления структуры межкристаллитного слоя от реальной. При расчете формулы (7) не учитывается характер изменения структуры межкристаллитного слоя в зависимости от степени дефектности кристаллитов или распределения их по размерам. Согласно соотношению (7), при изотермической кристаллизации гомополимера характеристики плавления кристалла определяются не только его морфологией, но и конформационной энтропией петлеобразно закрепленных в кристалле частей макромолекул межкристаллитного слоя, отличающейся от конформационной энтропии макромолекул аморфных областей. Учет конформационной энтропии частей макромолекул межкристаллитного слоя в соотношении (1) для свободной энергии зародыша кристаллизации позволяет получить удовлетворительное соответствие экспериментальных и расчетных результатов исследования процесса плавления.

ЛИТЕРАТУРА

1. Е. В. Фишер. В кн.: Физическая химия за рубежом. М., Мир, 1970, с. 9.
2. К. А. Гаспарян, В. А. Бороховский, Л. К. Севастьянов, Р. Г. Мирзоев, В. Г. Баранов. Высокомолек. соед., А 18, №3, 549 (1976).
3. Л. Манделькern. Кристаллизация полимеров. Л., Химия, 1996.
4. Г. Т. Ованесов, Д. А. Нерсисян, Ю. К. Кабала. Изв. АН Армянской ССР, Физика, 8, 297 (1973).
5. Ю. К. Годовский, Ю. П. Барский. Высокомолек. соед., А 8, №3, 395 (1966).
6. С. Г. Владовский, В. Г. Баранов. Высокомолек. соед., А 8, №2, 258 (1983).

ՀԱՌՈՒՆ ՇՂԹԱՆԵՐՈՎ ՊՈԼԻՄԵՐՆԵՐԻ ՀԱՎԱՆ ՏԻՐՈՒՅԹԻ ԵՎ ՆՐԱՆՑ ԲՅՈՒՐԵՂԱՑՄԱՆ ԶԵՐՄԱՍՏԻՃԱՆԻ ԿԱԽՎԱԾՈՒԹՅԱՆ ՀԱՇՎԱՐԿ

Ա. Մ. ՄԱՇՈՐԻԱՆ, Գ. Թ. ՕՎԱՆԵՍՈՎ, Զ. Ա. ԳՐԻԳՈՐԻԱՆ, Կ. Ա. ԳԱՍՊԱՐԻԱՆ

Հաշվի առնելով միջբյուրեղական թաղանթի և ամորֆ տիրույթի մակրոմոլեկուլների կոնֆորմացիոն էնտրոպիայի տարբերությունը հալման ջերմաստիճանային տիրույթում կախված բյուրեղացման ջերմաստիճանից, կատարված է պոլիմերների բյուրեղացման աստիճանի փոփոխման հաշվարկ, Ստացված է փորձնական և հաշվարկային բյուրեղացման աստիճանի ջերմաստիճանային կախվածության բավարար համապատասխանություն:

CALCULATION OF THE FLEXIBLE CHAIN POLYMERS MELTING RANGE DEPENDENCE ON THE CRYSTALLIZATION TEMPERATURE

A. M. MASHOORIAN, G. T. OVANESOV, Z. A. GRIGORIAN, K. A. GASPARIAN

A calculation of the change of the crystallization rate in the range of the melting temperature has been done depending on the crystallization temperature taking into consideration the difference of the conformational entropy of macromolecule parts of an intercrystallite layer and macromolecules of amorphous areas. A satisfactory accordance of calculated and experimental temperature dependences of the crystallization is obtained.

CONTENTS

L. Sh. Grigorian, A. A. Saharian. Quantum radiation of scalar particles by moving mirrors. II.	275
N. A. Korkhmazian, L. A. Gevorgian. Radiation of a fast particle in an inverse medium	283
A. G. Bagdov, A. V. Shekoyan, Z. N. Danoyan. Nonlinear wave beams in a piezosemiconducting layer	287
H. M. Chplakhian, D. M. Minasian, G. A. Eloyan, K. K. Petrosian. Account of tunnelling in theory of monomolecular reactions	297
A. Ts. Sarkissyan, L. S. Bezhanova, S. M. Yailoyan, E. B. Abrahamyan, Kh. V. Kotandgian, A. P. Antonyan. On the molecular theory of the rotational viscosity of nematic liquid crystals	303
V. M. Aroutionian, V. V. Bouniatian. On the sensitivity of the surface microwave impedance of HTSC films to the optical excitation	310
A. M. Yeghiazarian, Kh. V. Kotandgian, Yu. N. Gazarian. Temperature field in anisotropic medium in the presence of a steady temperature gradient	313
A. M. Mashoorian, G. T. Ovanesov, Z. A. Grigorian, K. A. Gasparian. Calculation of the flexible chain polymers melting range dependence on the crystallization temperature	316

Բ Ո Վ Ա Ն Դ Ա Կ Ո Ւ Թ Յ Ո Ւ Ն

Լ. Շ. Գրիգորյան, Ա. Ա. Սահարյան. Սկայար մասնիկների թվանույթին ճառագայթումը շարժվող հայելիներով: II.	275
Ն. Ա. Դորխմազյան, Լ. Ա. Գեվորգյան. Արագ մասնիկի ճառագայթումն ինվերս միջավայրում	283
Ա. Գ. Բագդով, Ա. Վ. Շեկոյան, Զ. Ն. Դանոյան. Ոչ գծային ալիքային փնջերը այնգոլիսահաղորդիչ շերտում	287
Հ. Մ. Զփլախյան, Դ. Մ. Մինասյան, Գ. Ա. Էլոյան, Կ. Կ. Պետրոսյան. Թունելային անցումների հաշվառումը մոնոմոլեկուլյար ռեակցիաների տեսության մեջ	297
Ա. Յ. Սարգսյան, Լ. Ս. Բեժանովա, Ս. Մ. Յալոյան, Է. Բ. Աբրահամյան, Խ. Վ. Կոտանդջյան, Ա. Պ. Անտոնյան. Նեմատիկ հեղուկ բյուրեղների պատողական մածուցիկության մոլեկուլային տեսության մասին	303
Վ. Մ. Հարությունյան, Վ. Վ. Բունիաթյան ԲԶԳԹ ԳԲՀ մակերևութային իմպեդանսի բաղադրիչների զգայունությունը օպտիկական գրգռման նկատմամբ	310
Ա. Մ. Եղիազարյան, Ն. Վ. Զորանջյան, ՅՈՒ. Ն. Գազարյան. Անիզոտրոպ միջավայրում ջերմաստիճանային դաշտը հաստատված ջերմաստիճանային գրադիենտի դեպքում	313
Ա. Մ. Մաշուրյան, Գ. Թ. Օվանեսով, Զ. Ա. Գրիգորյան, Կ. Ա. Գասարյան. Մկուն շղթաներով պոլիմերների հալման տիրույթի ել մրանց բյուրեղացման ջերմաստիճանի կախվածության հաշվարկ	316

Технический редактор В. Д. СТЕПАНЯН

Сдано в набор 14.07.1997 г. Подписано к печати 7.10.1997 г.

Формат 70×108¹/₁₆. Бумага №1, «сыктывкарская». Высокая печать. Печ. лист. 3.

Усл. печ. лист. 4,2. Усл. кр. отт. 4,5. Тираж 200. Заказ 21.

Издат. 7952. Цена договорная.

Издательство «Гитутюн» НАН РА, 375019, Ереван-19, пр. Маршала Баграмяна, 24-г.
Типография Издательства НАН Армении, 378410, г. Аштарак.

[500455]

A2K 415

1997, 1.32

Индекс 77709

СОДЕРЖАНИЕ

Л. Ш. Григорян, А. А. Саарян. Квантовое излучение скалярных частиц движущимися зеркалами. I.	223
Д. А. Бадалян, Р. М. Абрамян. Применение атом-атом потенциалов при исследовании вращательных фазовых переходов в пластических и жидких кристаллах. II. Жидкие кристаллы	229
А. М. Ишханян. Асимметричная дифракция трехуровневых атомов в поле двух стоячих волн	235
М. Л. Тер-Микаелян. Новый метод исследования резонансного взаимодействия лазерного излучения с простейшими атомами	242
Г. А. Варданян, А. А. Геворгян. Влияние сильного поглощения на оптические характеристики холестерических жидких кристаллов	252
Б. В. Хачатрян. О силе реакции излучения	260
С. С. Фелекян, В. Ф. Морозов, В. И. Варданян. Метод определения энтальпии плавления γ -облученного полиэтилена на основе рентгенструктурных данных.	263
А. Г. Гулян, Г. А. Двоян, Р. М. Мартиросян, Г. А. Пирумян. Амплифазометр СВЧ	267