

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. Հ. 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. Mkrtchyan
V. O. Papanyan
A. A. Mirzakhanyan, executive secretary

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

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

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

МАГНИТНАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ РАЗМЕРНО КВАНТОВАННОЙ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ ПРОВОЛОКИ. РАЗМЕРНЫЙ ПЕРЕХОД «ДИАМАГНЕТИК-ПАРАМАГНЕТИК» В ПРОВОЛОКАХ

А. А. КИРАКОСЯН, М. К. КУМАШЯН, А. Л. АСАТРЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 28 апреля 1997г.)

Рассчитана магнитная восприимчивость носителей заряда в размерно квантованной полупроводниковой проволоке с круглым сечением. Выведены выражения для диа- и парамагнитной восприимчивостей как для вырожденного газа в квантовом и квазиклассическом пределах, так и для невырожденного газа. Показано, что с уменьшением радиуса проволоки при некотором его значении происходит размерный переход «диамагнетик-парамагнетик». Сделаны некоторые оценки восприимчивости электронного газа в проволоке GaAs.

Магнитные свойства низкоразмерных электронных систем исследованы во многих работах [1—10]. Успехи в технологии изготовления систем с одномерным (1D) газом носителей заряда (НЗ) продолжают стимулировать теоретические и экспериментальные исследования физических характеристик 1D систем. Обладая специфическими физическими свойствами, низкоразмерные системы являются также весьма удобными объектами для наблюдения различных осцилляционных эффектов, поскольку из-за размерного квантования критерии их наблюдения становятся менее жесткими [3, 4].

В данной работе выведено выражение для магнитной восприимчивости вырожденного 1D газа НЗ в тонкой проволоке круглого сечения в квантовом пределе, когда заполнен только первый магнитопроволочный уровень (МПУ), и в квазиклассическом приближении, когда имеется много заполненных уровней. Рассмотрен также случай невырожденного 1D газа НЗ.

1. Свободная энергия и химический потенциал газа НЗ в продольном магнитном поле

С учетом специфики закона дисперсии НЗ в проволоке, находящейся в магнитном поле H , направленном вдоль ее оси (ось z), выражение для плотности свободной энергии газа НЗ и условие нормировки можно представить в удобной для дальнейших расчетов форме:

$$F = \bar{n}_1 \mu - \frac{L(2m_{\parallel}^*)^{1/2}}{3\pi^2 \hbar R^2} \sum_i \int_{\varepsilon_i}^{\infty} (\varepsilon - \varepsilon_i)^{3/2} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon, \quad (1)$$

$$\bar{n} = \frac{L(2m_{||})^{1/2}}{\pi^2 \hbar R^2} \sum_i \int_{\varepsilon_i}^{\infty} (\varepsilon - \varepsilon_i)^{1/2} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon, \quad (2)$$

где $\bar{n}$ — концентрация НЗ, μ — химический потенциал, L — длина, R — радиус проволоки, $m_{||}$ — эффективная масса НЗ вдоль оси z , ε_i — энергия НЗ в квантовом состоянии i , $f_0(\varepsilon)$ — функция распределения НЗ.

В рамках модели параболической ямы [4] энергия МПУ с учетом также энергии спина в магнитном поле дается формулой:

$$\varepsilon_{nm} = \varepsilon_{nm0} + \frac{\hbar \omega_c}{2} \sigma, \quad \varepsilon_{nm0} = \hbar \omega \left(n + \frac{|m|+1}{2} \right) + \frac{\hbar \omega_c}{2} m, \quad (3)$$

где

$$\omega_c = \frac{eH}{m_{\perp} c}, \quad \omega_{c0} = \frac{eH}{m_0 c}, \quad \omega = (\omega_c^2 + \omega_0^2)^{1/2}, \quad (4)$$

$m_{\perp}$ — масса НЗ в плоскости сечения проволоки, m_0 — масса свободного электрона, ω_0 обусловлен размерным квантованием и играет роль «подгоночного» параметра модели. Входящие в (3) квантовые числа принимают значения: $n=0, 1, 2, \dots$, $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm M$, $M = [\omega_c/\omega_0]$, где $[x]$ — целая часть величины x , $\sigma = +1, -1$.

2. Магнитная восприимчивость вырожденного газа НЗ

Заменяя в (1) и (2) скобку с производной функции распределения НЗ дельта-функцией, получим:

$$F = \bar{n} \mu - \frac{L(2m_{||})^{1/2}}{3\pi^2 \hbar R^2} \sum_{n,m,\sigma} \left(\mu - \varepsilon_{nm} - \frac{\hbar \omega_{c0}}{2} \sigma \right)^{3/2} \cdot \Theta \left(\mu - \varepsilon_{nm} - \frac{\hbar \omega_{c0}}{2} \sigma \right), \quad (5)$$

$$\bar{n} = \frac{L(2m_{||})^{1/2}}{\pi^2 \hbar R^2} \sum_{n,m,\sigma} \left(\mu - \varepsilon_{nm} - \frac{\hbar \omega_{c0}}{2} \sigma \right)^{1/2} \cdot \Theta \left(\mu - \varepsilon_{nm} - \frac{\hbar \omega_{c0}}{2} \sigma \right), \quad (6)$$

где $\Theta(x)$ — функция единичного скачка.

2.1. Квантовый предел

В рассматриваемом случае все НЗ занимают состояния с $n=m=0$. Параметр ω_0 выбирается в форме [4]

$$\omega_0 = \frac{\hbar \lambda_{01}^2}{m_{\perp} R^2}, \quad (7)$$

где λ_{0k} — k -ый корень функции Бесселя $J_0(x)$.

Найдем химический потенциал μ из уравнения (6). Если $\varepsilon_{011} > \mu \geq \varepsilon_{00} + \hbar \omega_{c0}/2$ (ε_{011} — энергия спинового подуровня $\sigma=1$ второго МПУ), то НЗ заполняют спиновые подуровни МПУ: (0,0,1) и (0,0,1). Вводя химический потенциал проволоки (отсчитанный от спинового квантового уровня $\varepsilon_{00} = \hbar \omega/2$) в отсутствие магнитного поля [11]

$$\mu_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2 R^2}{8m_{||}}, \quad (8)$$

решение (6) можно представить в виде

$$\mu(H) = \mu_0 + \varepsilon_{00} + \frac{(\hbar\omega_{c0})^2}{16\mu_0}, \quad \hbar\omega_{c0} \leq 4\mu_0. \quad (9)$$

Если же $\varepsilon_{00} - \hbar\omega_{c0}/2 < \mu \leq \varepsilon_{00} + \hbar\omega_{c0}/2$, то НЗ заполняют только спиновый подуровень (0,0,1) и

$$\mu(H) = \varepsilon_{00} + 4\mu_0 - \frac{\hbar\omega_{c0}}{2}, \quad \hbar\omega_{c0} > 4\mu_0. \quad (10)$$

С учетом (5) — (10) для магнитного момента системы НЗ получим:

$$M = - \left(\frac{\partial F}{\partial H} \right)_V = \begin{cases} -\bar{n} \frac{\partial \varepsilon_{00}}{\partial H} + \frac{\bar{n} \mu_B^2}{2\mu_0} H, & \text{если } \hbar\omega_{c0} \leq 4\mu_0, \\ -\bar{n} \frac{\partial \varepsilon_{00}}{\partial H} + \bar{n} \mu_B, & \text{если } \hbar\omega_{c0} > 4\mu_0, \end{cases} \quad (11)$$

где $\mu_B = eh/2m_0c$ — магнетон Бора. Наличие слагаемого $\bar{n}\mu_B$ обусловлено расположением уровня химического потенциала под спиновым подуровнем $\sigma = -1$, когда все НЗ находятся на подуровне $\sigma = 1$, т.е. все спины направлены по полю.

Магнитную восприимчивость системы, с учетом (11), можно представить в виде суммы диамагнитной (χ_d) и парамагнитной (χ_s) частей:

$$\chi = \chi_d + \chi_s,$$

$$\chi_d = - \frac{2\bar{n} \mu_B^2}{\hbar\omega_0} \left(\frac{\omega_0}{\omega} \right)^3 = - \frac{2\bar{n} \mu_B^2}{\hbar\omega_0} \left(\frac{m_0}{m_{\perp}} \right)^2 \cdot \left(\frac{\omega_0}{\omega} \right)^3, \quad (12)$$

$$\chi_s = \frac{\bar{n} \mu_B^2}{2\mu_0} \Theta(4\mu_0 - \hbar\omega_{c0}), \quad (13)$$

где $\mu_B^* = (m_0/m_{\perp})\mu_B$ — эффективный магнетон Бора.

В слабых магнитных полях ($\omega_c \ll \omega_0$) диамагнитная восприимчивость не зависит от H и равна

$$\chi_d(0) \simeq - \frac{2\bar{n} \mu_B^2}{\hbar\omega_0} = - \frac{\bar{n} R^2}{2\lambda_{01}^2} \cdot \frac{m_0}{m_{\perp}} r_0, \quad (14)$$

где $r_0 = e^2/m_0c^2 \simeq 2,7 \cdot 10^{-13}$ см — „классический радиус“ электрона. С помощью (7), (8), (12) и (13) полную восприимчивость можно представить в виде функции от радиуса проволоки:

$$\chi = \chi_s \left[1 - \left(\frac{R}{R_0} \right)^6 \right], \quad (15)$$

где характерный радиус

$$R_0 = \frac{1}{\bar{n}^{1/3}} \left(\frac{\lambda_{01}^2 m_{\perp} m_{||}}{\pi^2 m_0^2} \right)^{1/6}. \quad (16)$$

В условиях заполнения первого уровня размерного квантования (при $H=0$)

$$\bar{n}R^3 \leq \frac{2j_{02}}{\pi^2} \left[1 - \left(\frac{j_{01}}{j_{02}} \right)^2 \right]^{1/2} \left(\frac{m_{||}}{m_{\perp}} \right)^{1/2} \simeq \left(\frac{m_{||}}{m_{\perp}} \right)^{1/2}, \quad (17)$$

следовательно,

$$R \leq R_{max} = \frac{1}{n^{1/3}} \left(\frac{m_{\perp}}{m_{||}} \right)^{1/6}. \quad (18)$$

Согласно (17) и (18),

$$\frac{R_0}{R_{max}} = \left(\frac{j_{01}}{\pi^2} \frac{m_{\perp}}{m_0} \right)^{1/3}. \quad (19)$$

Если $R_{max} \leq R_0$, газ H3 в целом парамагнитен. Если же $R_{max} > R_0$, то для значений $R < R_0$ газ H3 в проволоке проявляет парамагнитные, а при $R_0 < R \leq R_{max}$ — диамагнитные свойства.

Таким образом, образцы из одного и того же материала с $R < R_0$ будут парамагнитны, а с $R > R_0$ — диамагнитны, т.е. будет иметь место переход «диамагнетик-парамагнетик», обусловленный изменением радиуса проволоки. Аналогичный эффект «подавления» диамагнетизма размерным квантованием имеет место в малых металлических частицах [12]. Для проволоки из $GaAs$ ($m_{\perp} \simeq 0.068 m_0$) $R_0 \simeq 0.26 R_{max}$, поэтому образцы с $R > 0.26 R_{max}$ будут диамагнетиками, при этом для максимального значения $|\chi_d|$ из (12) получим (при $R_{max} \simeq 10^{-6}$ см)

$$|\chi_d|_{max} = \frac{1}{2j_{01}} \left(\frac{m_{||}}{m_0} \right)^{1/2} \left(\frac{m_{\perp}}{m_0} \right)^{-3/2} \cdot \frac{r_0}{R_{max}} \simeq 3,5 \cdot 10^{-7}. \quad (20)$$

В рассматриваемом пределе слабых магнитных полей выражение для спинного парамагнетизма (13) можно, как и для 2D- и 3D-систем, представить в виде $\mu_B^2 g(\mu_0)$, где $g(\mu_0)$ — полная плотность состояний (с учетом спинного множителя $g=2$) на уровне Ферми.

При увеличении H диамагнитная восприимчивость убывает монотонно, а парамагнитная восприимчивость скачком падает до нулевого значения при

$$H_c = \frac{\pi^4}{2} \cdot \frac{\hbar c}{e} \cdot \frac{m_0}{m_{||}} \bar{n}^2 R^4, \quad (21)$$

что соответствует переходу химического потенциала через уровень $\epsilon_{00} + \hbar\omega_{c0}/2$.

Однако исследование поведения магнитной восприимчивости в квантовом пределе следует проводить вместе с выяснением условий заполнения только первого МПУ. С этой целью введем безразмерные величины: химпотенциал μ' , энергию ϵ' уровня, ближайшего к уровню $\epsilon_{00} + \hbar\omega_{c0}/2$, и энергию спинного расщепления ϵ'_s :

$$\mu' = \frac{1}{\mu_0} \left(\mu - \epsilon_{00} + \frac{\hbar\omega_{c0}}{2} \right), \quad \epsilon' = \frac{1}{\mu_0} (\epsilon_{0,-1} - \epsilon_{00}), \quad \epsilon'_s = \frac{\hbar\omega_{c0}}{\mu_0}, \quad (22)$$

где начало отсчета энергий ведется от уровня $\varepsilon_{00} = \hbar\omega_c/2$.

При некотором H_m , определяемом из условия

$$\mu'(H_m) = \varepsilon'(H_m), \quad (23)$$

начинается заполнение второго МПУ $\varepsilon_{0,-1}$. В зависимости от концентрации $\bar{n}$ поле H_m может быть как больше, так и меньше H_c . Если $\bar{n} > \bar{n}_0$, которую определим ниже, то $H_m > H_c$, и (23) сводится к уравнению четвертой степени относительно H_m . Если же $\bar{n} < \bar{n}_0$, то $H_m < H_c$, и (23) легко решается:

$$H_m = \frac{2\mu_0}{\mu_B} \left[\left(\frac{\hbar\omega_0}{2\mu_0} \right)^2 - 1 \right]. \quad (24)$$

Значение $\bar{n}_0$ находится из равенства $H_m(\bar{n}_0) = H_c(\bar{n}_0)$ и дается выражением

$$\bar{n}_0 = \frac{2\lambda_{01}}{\pi^2 R^3} \left(\frac{m_{||}}{m_{\perp}} \right)^{1/2} \cdot \left(1 + \frac{m_0}{m_{\perp}} \right)^{-1/4}. \quad (25)$$

Максимальное значение плотности $\bar{n}_m$, при котором второй МПУ еще не заполняется, определяется из (23) при $H_m = 0$ и равно

$$\bar{n}_m = 2\bar{n}_0 \left(1 + \frac{m_0}{m_{\perp}} \right)^{1/4} = \frac{4\lambda_{01}}{\pi^2 R^3} \left(\frac{m_{||}}{m_{\perp}} \right)^{1/2}, \quad (26)$$

что совпадает с (17) при $\bar{n} = \bar{n}_m$.

Таким образом, при изменении n в области $\bar{n}_0 < \bar{n} < \bar{n}_m$ восприимчивость является плавной функцией H , а при $\bar{n} < \bar{n}_0$ терпит скачок при $H = H_c$.

2.2. Квазиклассический предел

Когда имеется много заполненных уровней, характерный параметр ω_0 можно оценить из условия, что при энергии, равной энергии Ферми μ , классически доступная область движения НЗ равна толщине проволоки, т. е. [4]

$$\omega_0 = \frac{1}{2R_0} \left(\frac{2\mu}{m_{\perp}} \right)^{1/2}. \quad (27)$$

Расчеты с помощью (1) и (2) удобно проводить отдельно для слабых и сильных магнитных полей.

В слабых полях ($\omega_c \ll \omega_0$) $M = 0$, и входящие в (5) и (6) суммы по n можно вычислить с помощью формулы суммирования Пуассона [13]. Поскольку $\mu \gg \hbar\omega$, можно в формуле Пуассона интегралы Френеля заменить их асимптотическими значениями. Полученное выражение для химпотенциала можно представить в виде $\mu = \bar{\mu}_0 + \delta\mu(H)$, где

$$\delta\mu(H) \approx \mu_0 \frac{\omega_c^2}{3\omega_0^2} \ll \bar{\mu}_0, \text{ а}$$

$$\bar{\mu}_0 = \frac{3\pi^2 R n \hbar^2}{8(m_{\perp} m_{\parallel})^{1/2}}. \quad (28)$$

Поправка к хипотенциалу обуславливает появление в выражении свободной энергии слагаемых, пропорциональных $(\delta\mu)^2 \sim (\omega_c / \omega_0)^4$, следовательно, можно в выражениях как для монотонной, так и для осциллирующей частей свободной энергии положить $\bar{\mu} = \mu_0$.

Для монотонной части магнитной восприимчивости получаем

$$\chi_{\parallel}^0 = -\frac{16}{5} \mu_B^2 m_{\perp} \bar{n} R^2 \hbar^{-2}, \quad (29)$$

что лишь числовым коэффициентом отличается от (14). Аналогичный результат для 2D электронного газа получен в [10]. Этого следовало ожидать, поскольку $|\chi| \sim \bar{n}$, а увеличение $\bar{n}$ приводит лишь к росту числа заполненных уровней, не меняя при этом зависимости χ от характеристик проволоки (R) и НЗ (μ_B^*). По оценкам, спиновая восприимчивость $\chi_s \approx (m_{\perp}/m_0)^2 \cdot |\chi_{\parallel}^0| \cdot Z_0^{-2} \ll |\chi_{\parallel}^0|$, где параметр

$$Z_0 = \frac{\bar{\mu}_0}{\hbar \omega_0} = \left[\frac{3\pi^2}{4} \left(\frac{m_{\perp}}{m_{\parallel}} \right)^{1/2} \bar{n} R^3 \right]^{1/2} \gg 1 \quad (30)$$

есть число заполненных МПУ.

При вычислении осциллирующей составляющей восприимчивости $\chi_{\sim}$ при $\omega_c \ll \omega_0$ можно записать

$$\chi_{\sim} = -\frac{\partial^2 F}{\partial H^2} \approx \frac{e^2}{m_{\perp}^2 c^2} \cdot \frac{1}{\omega_0} \cdot \frac{\partial F_{\sim}}{\partial \omega}. \quad (31)$$

Наибольшее слагаемое в (31) равно

$$\chi_{\sim} = -\frac{15}{2^{7/2}} \frac{\chi_{\parallel}^0}{Z_0^{3/2}} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^l}{l^{3/2}} \cos\left(\pi l \frac{\omega_{c0}}{\omega_0}\right) \cdot \cos\left(2\pi l Z_0 - \frac{\pi}{4}\right). \quad (32)$$

Ввиду наличия множителя $Z_0^{-3/2} |\chi_{\sim}| \ll |\chi_{\parallel}^0|$.

$\chi_{\sim}$ имеет периодичность, обусловленную изменением радиуса проволоки с периодом

$$\Delta R \approx \frac{2}{3} \cdot \frac{R}{Z_0}, \quad (33)$$

что находится в соответствии с качественной оценкой [4]. Осцилляции $\chi_{\sim}$ при изменении H , ввиду условия $\omega_0/\omega_{c0} \equiv l_0 \gg 1$, могут проявляться только в гармониках с $l \geq l_0$, однако их вклад в $\chi_{\sim}$ пропорционален $l_0^{-3/2}$.

Таким образом, согласно (29) и (31), в слабых полях газ НЗ диамагнитен.

В сильных полях ($\omega_c \ll \omega_0 \ll \omega_0 Z_0^{1/2}$), когда $1 \ll M \ll Z_0^{1/2}$, монотонную часть восприимчивости можно представить в форме $\chi_{d\parallel} + \chi_{s\parallel}$, где

$$\chi_{s\parallel} = \frac{15}{2^{16/3}} \left(\frac{m_{\perp}}{m_0} \right)^2 \frac{|\chi_{\parallel}^0|}{Z_0^2}, \quad \chi_{d\parallel} = -\frac{1}{3} \chi_{s\parallel} \left(\frac{m_0}{m_{\perp}} \right)^2 (1 + \xi), \quad (34)$$

$$\xi = \frac{24}{5 \cdot 2^{1/2}} \left(\frac{\omega_0}{\omega_c} Z_0^2 R^2 \right)^{1/2} \gg 1. \quad (35)$$

Таким образом, как в сильных, так и в слабых полях газ НЗ проявляет диамагнитные свойства. Такое поведение χ в проволоке существенно отличается от ее поведения в массивном образце [13].

Для осциллирующей части восприимчивости получаем:

$$\chi_{\sim} \approx - \frac{\chi_{||}^0}{Z_0^{1/2}} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^l}{l^{1/2}} \cos \left(\pi l \frac{m_{\perp}}{m_0} \right) \cdot \cos \left(\pi l \frac{2^{1/2} \bar{\mu}_0}{\hbar \omega_c} - \frac{\pi}{4} \right). \quad (36)$$

Обсудим теперь условия, при выполнении которых $\omega_c \gg \omega_0$. Из формул (27), (28) и (30) следует, что

$$\omega_0 = \frac{\hbar}{2m_{\perp} R^2} Z_0. \quad (37)$$

Напряженность поля, в котором циклотронная частота равна ω_0 , дается формулой

$$H_0 = \frac{c \hbar}{2e R^2} Z_0. \quad (38)$$

Даже при значении $Z_0 \sim 10$, чему при $R \sim 10^{-6}$ см и $m_{\perp} \sim m_{||}$ соответствуют концентрации $\bar{n} > \bar{n}_0 \approx 1,3 \cdot 10^{18}$ см $^{-3}$, из (38) получается оценка $H_0 \approx 3 \cdot 10^5$ Гс. Тем самым условие $\omega_c \gg \omega_0$ может иметь место в магнитных полях $H \geq 10^6$ Гс.

3. Магнитная восприимчивость вырожденного газа НЗ

Подстановка в условие нормировки бoльцмановской функции распределения приводит к следующему выражению для химпотенциала системы НЗ:

$$\mu = k_B T \ln \left[\bar{n} R^2 \left(\frac{2\pi^2 \hbar^3}{m_{||} k_B T} \right)^{1/2} Z_s^{-1} \cdot Z_d^{-1} \right], \quad (39)$$

где

$$Z_s = 2 \operatorname{ch} \left(\frac{\mu_B \hbar H}{k_B T} \right), \quad (40)$$

$$Z_d = \frac{1}{2 \operatorname{sh}(\hbar \omega / 2 k_B T)} [S(\omega + \omega_c) + S(\omega - \omega_c) + 1], \quad (41)$$

а

$$S(\omega) = \exp \left\{ - \frac{(M+1) \hbar \omega}{4 k_B T} \right\} \cdot \frac{\operatorname{sh}(M \hbar \omega / 4 k_B T)}{\operatorname{sh}(\hbar \omega / 4 k_B T)}. \quad (42)$$

Выразив свободную энергию (1) через химпотенциал и воспользовавшись определением магнитной восприимчивости, из (39)–(41) получим:

$$\chi = -\bar{n} \left(\frac{\partial^2 \mu}{\partial H^2} \right)_{T,V} = \chi_s + \chi_d, \quad (43)$$

где

$$\chi_s = \frac{\bar{n} \mu_B^2}{k_B T} \operatorname{ch}^{-2} \left(\frac{\mu_B H}{k_B T} \right). \quad (44)$$

есть парамагнитная восприимчивость газа НЗ. Ввиду громоздкости аналитического выражения χ_d целесообразно рассмотреть его в предельных случаях слабых и сильных полей.

В слабых магнитных полях ($\omega_c \ll \omega_0$), принимая во внимание также условие наблюдения квантового размерного эффекта ($k_B T \ll \Delta z \sim \hbar \omega_0$), для диамагнитной восприимчивости получим выражение (14). При этом входящая в нее концентрация НЗ $\bar{n}$ должна удовлетворять критерию применимости статистики Больцмана, имеющего в рассматриваемом случае вид

$$\bar{n} R^2 \lambda_B \ll 2 \exp \left(-\frac{\hbar \omega_0}{2 k_B T} \right), \quad (45)$$

где $\lambda_B = 2\pi \hbar / (m_{\perp} k_B T)^{1/2}$ — длина де-Бройлевской волны НЗ. Для проволоки из GaAs с $R \approx 10^{-6}$ см, $m_{\perp} \sim m_{\parallel} \approx 0,068 m_0$ при $T \sim 100$ К (при этом $k_B T \sim \hbar \omega_0/6$) получаем оценку $\bar{n} \leq 10^{16}$ см $^{-3}$.

Если $\hbar \omega_c \ll k_B T \ll \hbar \omega_0$, то из (44) получим формулу Кюри: $\chi_s \approx \bar{n} \mu_B^2 / k_B T$. Для полной восприимчивости имеем:

$$\chi = \frac{\bar{n} \mu_B^2}{k_B T} \left[1 - \left(\frac{m_0}{m_{\perp}} \right)^2 \frac{2 k_B T}{\hbar \omega_0} \right]. \quad (46)$$

Знак восприимчивости определяется отношением характерных энергий $k_B T$ и $\hbar \omega_0/2$, а также $m_0/m_{\perp}$. При данной T $\chi=0$ при значении радиуса

$$R_0 = \left(\frac{\hbar^2 i_{01}^2}{2 m_0 k_B T} \cdot \frac{m_{\perp}}{m_0} \right)^{1/2} \equiv i_{01} \cdot \frac{i_{01}}{(8\pi)^{1/2}} \left(\frac{m_{\parallel}}{m_0} \right)^{1/2} \left(\frac{m_{\perp}}{m_0} \right)^{1/2}. \quad (47)$$

Для проволоки GaAs при $T \approx 100$ К $R_0 \approx 12$ Å.

Если же $k_B T \ll \hbar \omega_c \ll \hbar \omega_0$, то χ_s — экспоненциально малая величина, и газ НЗ в проволоке диамагнитен.

В пределе сильных магнитных полей ($\omega_c \gg \omega_0$) χ_s также экспоненциально малая величина, а для диамагнитной восприимчивости получаем:

$$\chi_d = -\frac{\bar{n} \mu_B^2}{\hbar \omega_0} \left(\frac{\omega_0}{\omega_c} \right)^2 \left(1 + 2 \frac{\omega_0}{\omega_c} \right) \text{ при } \frac{\hbar \omega_c}{8 k_B T} \left(\frac{\omega_0}{\omega_c} \right)^2 \ll 1 \text{ и } \frac{\hbar \omega_0}{8 k_B T} < 1, \quad (48)$$

при этом критерий применимости статистики Больцмана имеет вид

$$\bar{n} R^2 \lambda_B \ll \frac{\omega_c}{\omega_0} \exp \left(-\frac{\hbar \omega_c}{8 k_B T} \right). \quad (49)$$

В условиях, когда $(\hbar \omega_c / 8 k_B T) (\omega_0 / \omega_c)^2 \ll 1$ и $(\hbar \omega_0 / 8 k_B T) > 1$, для диамагнитной восприимчивости получаем

$$\chi_d = - \frac{2\bar{n}_B^2}{\hbar\omega_c} \left[1 - \frac{4\hbar\omega_c}{k_B T} \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega_c} \right)^2 \right], \quad (50)$$

а критерий применимости статистики Больцмана имеет вид

$$\bar{n}k_B T \ll \left(1 + \frac{8k_B T}{\hbar\omega_c} \cdot \frac{\omega_c}{\omega_0} \right) \exp \left(- \frac{\hbar\omega_c}{2k_B T} \right). \quad (51)$$

Ввиду экспоненциальной малости χ_d в сильных магнитных полях газ НЗ диамагнитен.

ЛИТЕРАТУРА

1. А. М. Косевич, И. М. Лифшиц. ЖЭТФ, 29, 753 (1955).
2. М. Ш. Ерухимов, Б. А. Тавгер. ЖЭТФ, 53, 926 (1967).
3. Б. А. Тавгер, В. Я. Демиковский. УФН, 96, 62 (1968).
4. Б. А. Тавгер, М. Д. Блох, Е. М. Фишман. ФММ, 33, 1137 (1972).
5. R. Dingle. Festkörperprobleme (Adv. sol. stat. phys.), 15 (1975).
6. D. Roychoudhury, P. K. Basu. Int. Electronics, 44, 397 (1978).
7. D. Shoenberg. J. Low Temp. Phys., 56, 317 (1983).
8. W. Zawadski. Solid State Commun., 47, 317 (1983).
9. W. Zawadski. J. Phys. C: Solid State Phys., 17, L145 (1984).
10. А. А. Киракосян, М. К. Кумашян. Изв. АН Арм.ССР, Физика, 24, 141 (1989).
11. А. А. Киракосян. Изв. АН Арм.ССР, Физика, 9, 429 (1974).
12. Ю. И. Петров. Физика малых частиц. М., Наука, 1982.
13. А. И. Ансальм. Введение в теорию полупроводников. М., Наука, 1978.

MAGNETIC SUSCEPTIBILITY OF SIZE-QUANTIZED WIRE. «DIAMAGNETIC-PARAMAGNETIC» SIZE-TRANSITION IN WIRES

A. A. KIRAKOSIAN, M. GH. GHOMASHIAN, A. L. ASATRIAN

The magnetic susceptibility of charge carriers in a size-quantized semiconductor wire with circular cross-section is calculated. The expressions for dia- and paramagnetic susceptibilities are derived both for degenerate gas in the quantum and quasiclassical limits and for nondegenerate one. It is shown that with decreasing of the wire radius at its certain value the «diamagnetic-paramagnetic» size-transition occurs. Some estimations of electron gas susceptibility in GaAs wire are made.

ՉԱՓԱՅՆՈՐԵՆ ՔՎԱՆՏԱՅՎԱԾ ԿԻՍԱԶԱՂՈՐԴՉԱՅԻՆ ԼԱՐԻ ՄԱԳՆԻՏԱԿԱՆ ԸՆԿԱԼՈՒՆԱԿՈՒԹՅՈՒՆԸ: «ԴԻԱՄԱԳՆԵՏ-ՊԱՐԱՄԱԳՆԵՏ» ՉԱՓԱՅԻՆ ԱՆՅՈՒՄԸ ԼԱՐՆՐՈՒՄ

Ա. Ա. ԿԻՐԱԿՈՍՅԱՆ, Մ. Գ. ԳՈՒՄԱՇՅԱՆ, Ա. Լ. ԱՍԱՏՐՅԱՆ

Հաշվված է լիցքակրիների մագնիսական ընկալունակությունը շրջանային կտրվածքով չափաչափորեն բավարարված կիսահաղորդչային լարում: Ստացված են դիա- և պարամագնիսական ընկալունակության արտահայտություններն ինչպես ալլասերված դազի համար բավարարված և թվադրական սահմանում, այնպես էլ ոչ ալլասերված դազի համար: Ցույց է տրված, որ լարի շառավղի փոքրացմանը զուգընթաց նրա որոշակի արժեքի դեպքում տեղի է ունենում «դիա-մագնիս-պարամագնիս» չափային անցում: Կատարված են էլեկտրոնային դազի ընկալունակության գնահատումներ GaAs լարի համար:

МЕЖЗОННОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА В ПОЛУПРОВОДНИКЕ
С УЗКОЙ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНОЙ В КВАНТУЮЩЕМ
МАГНИТНОМ ПОЛЕ

А. П. ДЖОТЯН, Б. Г. ПОГОСЯН

Ереванский государственный университет

Гюмрийский педагогический институт

(Поступила в редакцию 6 июля 1997г.)

Исследовано межзонное поглощение света в полупроводниках с узкой запрещенной зоной, помещенных в квантующее магнитное поле. Найдены выражения для коэффициента магнитопоглощения света для прямых как разрешенных, так и запрещенных переходов. В последнем случае исследована зависимость коэффициента магнитопоглощения от поляризации световой волны.

Введение

Как известно, для исследования зонной структуры полупроводников широко используются оптические и магнитооптические явления, позволяющие получить адекватную картину электронного энергетического спектра. Исследования структуры зон магнитооптическими методами успешно выполнены для ряда полупроводников со стандартным законом дисперсии, для которых проведены также теоретические исследования [1].

С другой стороны, в настоящее время в физике полупроводников и полупроводниковой технике большое внимание уделяется полупроводниковым соединениям типа A^2B^5 , обладающим существенной непараболическостью закона дисперсии носителей заряда (закон дисперсии Кейна) [2, 3]. Следует отметить, что в числе их есть сравнительно узкозонные (InSb, InAs), в которых эффекты непараболическости проявляются уже при сравнительно небольших значениях квазимпульса. В связи с этим представляет интерес исследование в последних межзонного поглощения света в присутствии квантующего магнитного поля.

1. Энергетический спектр и плотность состояний в полупроводнике
с узкой запрещенной зоной в магнитном поле

В двузонном приближении [2] исходный энергетический спектр носителей заряда имеет вид:

$$\varepsilon_{\pm, v}(k) = \pm \frac{\varepsilon_g}{2} \left[1 + \left(\frac{2\hbar s k}{\varepsilon_g} \right)^2 \right]^{1/2} - \frac{\varepsilon_g}{2}, \quad (1.1)$$

где индекс c относится к зоне проводимости, v — к валентной зоне (за начало отсчета принято дно зоны проводимости), $\varepsilon_g = 2m_r \varepsilon^2$ — ширина запрещенной зоны, m_r — эффективная масса электрона на дне зоны проводимости, ε — параметр, пропорциональный матричному элементу «взаимодействия» зон, имеющий размерность скорости (в частности, для InSb $\varepsilon \approx 10^8$ см/с), k — волновой вектор носителя заряда.

Пусть внешнее постоянное магнитное поле H направлено по оси OZ : $H = (0, 0, H)$, а вектор-потенциал поля выбран в виде $A^0 = (0, Hx, 0)$. Ограничиваясь рассмотрением магнитных полей, в которых все еще имеет место неравенство $\lambda \gg a$ ($\lambda = \sqrt{\frac{c\hbar}{eH}}$ — магнитная длина, a — постоянная решетки), волновые функции носителей заряда в периодическом поле кристалла представим в виде [4]

$$\psi_n(x, y, z) = U_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) F_{n, \lambda, k_y, k_z}(x, y, z), \quad (1.2)$$

где $U_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$ — бловская функция электрона в точке экстремума $\mathbf{k}_0$, $n = \{c, v\}$, а функция $F_{n, \lambda, k_y, k_z}(\mathbf{r})$ при законе дисперсии (1.1) находится как решение следующего уравнения, аналогичного уравнению Клейна-Гордона для свободного релятивистского электрона в магнитном поле [5]:

$$\left[s^2 \left(-i\hbar \nabla + \frac{e}{c} A^0 \right)^2 + \frac{\varepsilon_g^2}{4} \right] F_n(\mathbf{r}) = \left(E_n + \frac{\varepsilon_g}{2} \right)^2 F_n(\mathbf{r}). \quad (1.3)$$

Решение (1.3) можно представить в виде

$$F_r(\mathbf{r}) = F_{c, N, k'_y, k'_z} = B_c e^{i(k'_y y + k'_z z)} \varphi_N(x - x_{0c}); \quad (1.4)$$

$$F_v(\mathbf{r}) = F_{v, N, k_y, k_z} = B_v e^{i(k_y y + k_z z)} \varphi_N(x - x_{0v}),$$

где $\varphi_N(x - x_{0n})$ — осцилляторная волновая функция в соответствующей зоне с центром осциллятора в точке $x_{0n} = -\frac{\hbar c}{eH} k_{yn}$, индекс $N = 0, 1, 2, \dots$ нумерует уровни Ландау в зонах, нормировочная постоянная

$$B_n = \sqrt{\frac{2}{V}} \left[\frac{\frac{\varepsilon_g}{2}}{E_n + \frac{\varepsilon_g}{2}} \right]^{1/2},$$

V — объем кристалла.

Соответственно, для энергетического спектра получаем:

$$E_n(k) = \pm \sqrt{\frac{\varepsilon_g^2}{4} + \hbar^2 s^2 k_z^2 + \varepsilon_g \mu H (2N + 1) - \frac{\varepsilon_g}{2}}, \quad (1.5)$$

где $\mu = \frac{e\hbar}{2m_r c}$ — аналог магнетона Бора в полупроводнике.

Как видно из (1.5), характерная особенность спектра состоит в неэквидистантности магнитных уровней, что подтверждается в ряде

экспериментальных работ (см., например, [6]). Благодаря малым значениям эффективных масс и соответственно большим значениям μ в узкощелевых полупроводниках (в InSb, где $m_e \approx 0,013m_0$, $\mu = 6,9 \cdot 10^{-19}$ эрг·Э⁻¹) может быть достигнута существенная перестройка энергетического спектра путем малых изменений величины H . Как и в случае стандартного закона дисперсии, энергетический спектр вырожден по k_y .

Для плотности состояний носителей заряда с кейновским законом дисперсии во внешнем магнитном поле находим:

$$g_N(E_n) = \frac{1}{2\pi^2 \hbar^3} \frac{1}{\lambda^2} \sum_N \left| E_n + \frac{\varepsilon_K}{2} \left[\left(E_n + \frac{\varepsilon_K}{2} \right)^2 - \frac{\varepsilon_K^2}{4} - \varepsilon_K H (2N+1) \right]^{-1/2} \right|, \quad (1.6)$$

где суммирование по N распространяется на все неотрицательные значения подкоренного выражения.

В области малых энергий, как и следовало ожидать, (1.6) переходит в соответствующее выражение для $g_N(F_n)$ в полупроводнике со стандартным законом дисперсии. По сравнению с последним учет непараболичности приводит к увеличению плотности состояний и, соответственно, к увеличению коэффициента поглощения.

2. Коэффициент межзонного поглощения света

Коэффициент магнитопоглощения $a_H(\omega)$ вычислим на основе стандартной квантово-механической техники с использованием выражений для волновых функций (1.2), (1.4) и энергетического спектра (1.5). Гамильтониан возмущения в поле световой волны с $A(r, t) = A_0 e^{-i(qr - \omega t)}$ во внешнем магнитном поле H с вектором-потенциалом $A_0(0, Hx, 0)$ имеет вид [7]

$$\hat{H}' = \frac{e}{m_0 c} A(r, t) \left[\hat{p} + \frac{e}{c} A^0 \right], \quad (2.1)$$

где m_0 — масса свободного электрона.

Для матричного элемента этого возмущения между волновыми функциями (1.2) носителей заряда в валентной зоне Ψ_v и зоне проводимости Ψ_c получаем:

$$P_{vc} = \frac{e}{m_0 c} \sum_z F_n^* F_n \Omega_0 \frac{1}{\Omega_0} \int_{\Omega_0} U_{ck}^* \hat{A} p U_{vk} d^3 r + \frac{e}{m_0 c} \sum_z F_n^* \hat{A} p F_n \Omega_0 \frac{1}{\Omega_0} \times \\ \times \int_{\Omega_0} U_{ck}^* U_{vk} d^3 r + \frac{e^2}{m_0 c^2} \sum_z F_n^* A A^0 F_n \Omega_0 \frac{1}{\Omega_0} \int_{\Omega_0} U_{ck}^* U_{vk} d^3 r, \quad (2.2)$$

где Z — число элементарных ячеек в объеме V (Ω_0 — объем элементарной ячейки).

2.1. Разрешенные переходы

В случае прямых разрешенных переходов вклад в P_{vc} дает лишь первый член в (2.2) (два последних слагаемых равны нулю из-за ортогональности функций $U_{c\mathbf{k}}$ и $U_{v\mathbf{k}}$, относящихся к различным зонам). Заменяя суммирование по $\mathbf{Z}$ интегралом по объему всего кристалла V ($V=1\text{см}^3$), для матричного элемента получаем:

$$P_{vc} = \frac{eA_0}{m_0c} B_v B_c (\hat{\mathbf{e}} \mathbf{p}_{cv}) \delta_{NN'} \delta_{k_y k'_y} \delta_{k_z k'_z}, \quad (2.3)$$

где $\delta_{mm'}$ — символ Кронекера, а

$$p_{cv}(\mathbf{k}) = -i\hbar \frac{1}{\Omega_0} \int_{\Omega_0} U_{c\mathbf{k}}^* \nabla U_{v\mathbf{k}} d^3r. \quad (2.4)$$

Число переходов в единицу времени, в единице объема, для которых выполняется закон сохранения энергии ($E_c = E_v + \hbar\omega$) и закон сохранения квазиимпульса ($\mathbf{k}' = \mathbf{k}$), вблизи точки экстремума $\mathbf{k}=0$ равно

$$W_{vc} = \frac{2\pi e^2 |A_0|^2}{\hbar m_0^2 c^2} |\hat{\mathbf{e}} \mathbf{p}_{cv}(0)|^2 \varepsilon_g^2 \times \\ \times \sum_{N=0} \left[\int \frac{2}{2\pi} dk_y \int \frac{2}{2\pi} dk_z \delta(E_c - E_v - \hbar\omega) \left(E_n + \frac{\varepsilon_g}{2}\right)^{-2} \right]. \quad (2.5)$$

Окончательно для коэффициента поглощения при прямых разрешенных переходах получаем

$$\alpha_p^H(\omega) = \frac{8e^2}{m_0^2 c \omega n_0} \frac{\varepsilon_g^2}{\hbar S} |\hat{\mathbf{e}} \mathbf{p}_{cv}(0)|^2 \frac{2m_r}{\hbar^2} \mu H \times \\ \times \frac{1}{\hbar\omega} \sum_{N=0} \frac{1}{\sqrt{\hbar^2 \omega^2 - \varepsilon_g^2 - 4\varepsilon_g \mu H (2N+1)}}, \quad (2.6)$$

где n_0 — показатель преломления полупроводника.

Таким образом, в случае прямых разрешенных переходов спектр поглощения формируется из отдельных линий, «ступенек», соответствующих переходам между уровнями Ландау с сохранением номера уровня N . Как следует из (2.6), край поглощения $\hbar\omega_0$ нелинейно зависит от величины магнитного поля H :

$$\hbar\omega_0 = \sqrt{\varepsilon_g(\varepsilon_g + 4\mu H(2N+1))}$$

и вследствие непараболичности сдвигается в область меньших энергий фотона. Для InSb при значениях $H \approx 10^4$ Э величина «ступеньки» порядка $\mu H \approx 10^{-14}$ эрг.

2.2. Запрещенные переходы

Рассмотрим прямые запрещенные переходы для двух ориентаций падающей электромагнитной волны и магнитного поля. В первом случае вектор поляризации $\mathbf{e}$ электромагнитной волны перпендикулярен магнитному полю ($\mathbf{e} \perp \mathbf{H}$), а во втором — параллелен ($\mathbf{e} \parallel \mathbf{H}$). В обоих случаях для функции $U_{ck}^*(\mathbf{r})$ и $\epsilon p_{cv}(\mathbf{k})$ воспользуемся разложением в ряд Тейлора в окрестности точки экстремума $\mathbf{k}_0$:

$$U_{ck'}^* = U_{ck_0}^* + (\mathbf{k}' - \mathbf{k}_0) \frac{\partial U_{ck}^*}{\partial \mathbf{k}} \Big|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0}; \quad (2.7)$$

$$\epsilon p_{cv}(\mathbf{k}) = \epsilon p_{cv}(\mathbf{k}_0) + \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \epsilon p_{cv}(\mathbf{k}) \right]_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0). \quad (2.8)$$

При ориентации вектора поляризации световой волны перпендикулярно $\mathbf{H}$ ($\mathbf{e} \perp \mathbf{H}$) в случае, когда экстремум энергии электрона находится в центре бриллюэновской зоны $\mathbf{k}_0 = 0$, из выражения (2.2) получаем:

$$P_{vc}^\perp = \frac{\epsilon A_0}{m_0 c} B_c B_v \left[k (\nabla \hat{\mathbf{e}} p_{cv}) \delta_{N'N} + q L_{vc} H \frac{e}{c} \lambda \left(\sqrt{\frac{N+1}{2}} \delta_{N',N+1} + \right. \right. \\ \left. \left. + \sqrt{\frac{N}{2}} \delta_{N',N-1} \right) \right] \times \delta_{k_y k'_y} \delta_{k_z k'_z}, \quad (2.9)$$

где

$$L_{vc} = \frac{1}{\Omega_0} \cdot \int_{\Omega_0} \left(\frac{\partial U_{ck}^*}{\partial \mathbf{k}} \right)_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} U_{vk} d^3 r. \quad (2.10)$$

Соответственно, для коэффициента поглощения получаем:

$$a_3^\perp(\omega) = \frac{8e^2}{m_0^2 c^3 \omega n_0} \frac{\epsilon_g^2}{\hbar s} \frac{L_{vc}^2 x_0^m}{\lambda^4} \hbar \omega \cos^2 \beta \sum_{N=0} \left[\frac{N+1}{2} \delta_{N',N+1} + \frac{N}{2} \delta_{N',N-1} \right] \times \\ \times \frac{1}{\sqrt{\hbar^2 \omega^2 - \epsilon_g^2 - 4\epsilon_g \mu H (2N+1)}}, \quad (2.11)$$

где β — угол между $\mathbf{q}$ и L_{vc} , x_0^m — толщина образца вдоль оси Ox .

Вкладом первого слагаемого из (2.9) в $a_3^\perp(\omega)$, пропорциональным $\sqrt{\hbar^2 \omega^2 - \epsilon_g^2 - 4\epsilon_g \mu H (2N+1)}$, пренебрегаем вследствие его малости у края поглощения. Как следует из (2.11), при указанной ориентации световой волны ($\mathbf{e} \perp \mathbf{H}$), как и в случае стандартного закона дисперсии носителей заряда [1], возникают новые правила отбора по N , допускающие возможность переходов между уровнями Ландау с изменением номера уровня на единицу; при этом $a_3^\perp(\omega)$ пропорционален квадрату величины магнитного поля H .

Во втором случае, при параллельной ориентации световой волны ($\mathbf{e} \parallel \mathbf{H}$), третий член в (2.2) обращается в нуль. Вычисления для коэффициента поглощения $a_3^\parallel(\omega)$ приводят к следующему результату:

$$a_{\frac{1}{2}}^{\parallel}(\omega) = \frac{2e^2}{m_j^2 c \omega n_0} \frac{\varepsilon_z^2}{\hbar^2 S^2} [(\hat{\nabla} \mathbf{P}_{cv})_z + \hbar q L_{cv}]^2 \frac{x_0^m}{\varepsilon^2} \frac{1}{\hbar \omega} \times \\ \times \sum_{N=0}^{\infty} \sqrt{\hbar^2 \omega^2 - \varepsilon_z^2 - 4\varepsilon_z^2 H(2N+1)}.$$
(2.12)

Как следует из (2.12), $a_{\frac{1}{2}}^{\parallel}(\omega)$ пропорционален первой степени H ; межзонные переходы осуществляются между уровнями Ландау с одинаковыми номерами N . Из-за непараболичности край поглощения $\hbar\omega_0$ как в случае разрешенных, так и для запрещенных переходов нелинеен относительно H и сдвинут в коротковолновую область.

В заключение авторы выражают благодарность Э. М. Казаряну за многочисленные плодотворные обсуждения и постоянное внимание к работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. И. М. Цидильковский. Зонная структура полупроводников. М., Наука, 1972.
2. E. O. Kane. J. Phys. Chem. Solids, 1, 82 (1956).
3. J. M. Shi, M. Pecters, J. T. Devreese. Phys. Rev. B, 48, 5202 (1993).
4. J. Luttinger, W. Kohn. Phys. Rev. 97, 869 (1955).
5. А. А. Соколов, И. М. Тернов. Релятивистский электрон. М., Наука, 1983.
6. Т. Мосс, Г. Барелл, Б. Эллис. Полупроводниковая оптоэлектроника. М., Мир, 1976.
7. А. И. Ансельм. Введение в теорию полупроводников. М., Наука, 1978.

INTERBAND LIGHT ABSORPTION IN SEMICONDUCTORS WITH NARROW FORBIDDEN BAND IN A QUANTIZING MAGNETIC FIELD

A. P. DJOTYAN, B. G. POGHOSYAN

Interband light absorption in semiconductors with a narrow forbidden band placed in a quantizing magnetic field is investigated. Expressions for the coefficient of magnetic light absorption are found for both direct allowed and forbidden transitions. In the last case the dependence of the coefficient of light absorption on the light wave polarization is studied.

ԼՈՒՑՍԻ ՄԻՋԳՈՏԻԱԿԱՆ ԿԼԱՆՈՒՄԸ ՆԵՂ ԱՐԳԵԼՎԱԾ ԴՈՏԻՈՎ
ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴԻԶՆԵՐՈՒՄ ՔՎԱՆՏԱՑՆՈՂ ՄԱԳՆԵՍԿԱՆ ԴԱՇՏՈՒՄ

Ա. Պ. ԶՈՏՅԱՆ, Բ. Ժ. ՊՈԴՈՍՅԱՆ

Հետազոտված է լույսի միջգոտիական կլանումը նեղ արգելված գոտիով կիսահաղորդիչներում բնականաբան մագնիսական դաշտի առկայությամբ: Լույսի միջգոտիական կլանման գործակցի համար ստացված են վերլուծական արտահայտություններ թույլատրելի և արգելված ուղիղ անցումների համար: Վերջին դեպքում հետազոտված է լույսի միջգոտիական կլանման գործակցի տեսքը լուսային ալիքի բևեռացման վեկտորի տարրեր կողմնորոշումների համար:



ПРИМЕСНЫЕ СОСТОЯНИЯ В КВАЗИНУЛЬМЕРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУРАХ С СИЛЬНО СПЛЮСНУТОЙ (ВЫТЯНУТОЙ) ЭЛЛИПСОИДАЛЬНОЙ ФОРМОЙ

А. С. ГАСПАРЯН, Э. М. КАЗАРЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 4 июля 1997г.)

В адиабатическом приближении получены аналитические выражения для энергетических уровней нижней части спектра и соответствующих им волновых функций электрона в непроницаемом полупроводниковом сильно сплюснутом (вытянутом) эллипсоиде вращения, в центре которого расположена водородоподобная примесь. Показано, что в рассмотренных структурах возможно получение на порядок больших энергий, чем в сферических, при одинаковых объемах, а также достигается полное снятие вырождения энергии примесных состояний, за исключением двукратного, связанного с модулем двумерного орбитального квантового числа.

Исследование размерных эффектов в полупроводниковых структурах с пониженной мерностью является в настоящее время одним из наиболее интенсивно развивающихся направлений физики твердого тела. При рассмотрении подобных объектов возникает необходимость решения кулоновской задачи со специфическими граничными условиями.

Одним из наиболее важных примеров квазинульмерных структур являются так называемые микрокристаллы, выращенные в различных диэлектрических средах (см. [1—3]). На данный момент теоретически хорошо исследованы микрокристаллы сферической формы [4, 5], поэтому представляется естественной попытка изучения примесных состояний в эллипсоидальных микрокристаллах. С другой стороны, как известно, важной особенностью физических систем, в которых движение носителей заряда пространственно ограничено (волновая функция равна нулю на конечных расстояниях от силового центра), является возможность управления энергетическим спектром таких систем при помощи изменения их геометрических параметров. С этой точки зрения эллипсоидальная форма лучше сферической вследствие наличия двух геометрических параметров (имеется в виду эллипсоид вращения).

Таким образом, изучение физических свойств эллипсоидальных систем является актуальной проблемой, а рассмотрение примесных состояний в квазинульмерных структурах с сильно сплюснутой или вытянутой эллипсоидальной формой представляет собой первый шаг на пути ее решения.

В настоящей работе исследование проводится в адиабатическом приближении и в рамках метода эффективной массы, предполагая тем

самым, что все существенные длины велики по сравнению с постоянной решетки.

1. Сильно сплюснутая эллипсоидальная потенциальная яма

Рассмотрим непроницаемый сильно сплюснутый эллипсоид вращения с диэлектрической постоянной ϵ , в центре которого имеется примесь заряда Ze . Тогда потенциальную энергию электрона можно представить в виде:

$$U(x, y, z) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{\epsilon(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}}, & \frac{x^2 + y^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2} < 1 \\ \infty, & \frac{x^2 + y^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2} > 1, \text{ где } b \ll a. \end{cases} \quad (1)$$

Очевидно, что для нахождения энергетических уровней нижней части спектра и соответствующих им волновых функций при движении электрона в таком эллипсоиде важное значение имеют длины полуосей эллипсоида по сравнению с эффективным боровским радиусом электрона

$a_0 = \frac{\hbar^2 \epsilon}{\mu Ze^2}$, где $\hbar$ и μ соответственно постоянная Планка и эффективная масса электрона в данной среде.

1.1. $a \gg a_0 \gg b$

В этом случае адиабатическое приближение применимо, и кроме того, при рассмотрении движения вдоль оси «z» («быстрая» подсистема) кулоновское взаимодействие может быть учтено как возмущение. Тогда в нулевом приближении получаем энергетический спектр и волновые функции одномерных стоячих волн со стенками, расположенными на расстоянии

$$b(x, y) = b \sqrt{1 - \frac{x^2 + y^2}{a^2}} \quad (2)$$

от начала координат. В низших состояниях частица локализована на расстояниях $\rho = \sqrt{x^2 + y^2} \ll a$, поэтому выражение для энергии стоячих волн можно разложить в ряд по степеням $\frac{\rho^2}{a^2}$, сохранив первые два члена.

При определении поправки, вносимой кулоновским взаимодействием, учтем, что $\rho \sim a_0 \Rightarrow \rho \gg |z|$, поэтому $\sqrt{\rho^2 + z^2} \approx \rho$. Тогда для энергии одномерного движения получим:

$$U(\rho) = \frac{\hbar^2 \pi^2 N_1^2}{8\mu b^2} + \frac{\hbar^2 \pi^2 N_1^2}{8\mu a^2 b^2} \rho^2 - \frac{Ze^2}{\epsilon \rho}, \quad (3)$$

где $N_1 = 1, 2, \dots$ — квантовое число одномерных стоячих волн.

Поправка к волновым функциям равна нулю вследствие их ортогональности.

Перейдем к решению двумерного уравнения Шредингера с оператором потенциальной энергии (3).

1.1a. $a_0 \ll \sqrt{ab}$

При этом условии второй член из выражения (3) может рассматриваться как возмущение. Тогда в нулевом приближении задача сведется к двумерной кулоновской. Найдя затем поправку, вносимую осцилляторным членом, для энергетических уровней нижней части спектра трехмерной системы получим:

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2 N_1^2}{8\mu b^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2 \left(N - \frac{1}{2}\right)^2} + \frac{\hbar^2 \pi^2 N_1^2}{16\mu} \cdot \frac{a_0^2}{a^2 b^2} \left(N - \frac{1}{2}\right)^2 \times \\ \times \left[5 \left(N - \frac{1}{2}\right)^2 + 1 - 3 \left(m^2 - \frac{1}{4}\right) \right], \quad (4)$$

где $N=1, 2, \dots$ — двумерный аналог трехмерного главного квантового числа, $|m|=1, 2, \dots, N-1$ — двумерное орбитальное квантовое число.

Из применимости теории возмущений следует ограничение на квантовые числа:

$$N_1^2 \left(N - \frac{1}{2}\right)^4 \left| 5 \left(N - \frac{1}{2}\right)^2 + 1 - 3 \left(m^2 - \frac{1}{4}\right) \right| \leq \frac{ab}{a_0^2}, \quad (5)$$

которое всегда выполняется для низших состояний.

Волновые функции трехмерного движения в нулевом приближении представляются в виде произведения волновых функций одномерных стоячих волн и двумерных кулоновских. Соответствующую поправку нетрудно будет найти по теории возмущений.

1.1б. $a_0 \sim \sqrt{ab}$

Теперь всю потенциальную энергию (разность между вторым и третьим членом в выражении (3)) будем рассматривать как возмущение. Тогда, согласно [6], для энергетических уровней найдем:

$$E \approx \frac{\hbar^2 \pi^2 N_1^2}{8\mu b^2} \pm \frac{\hbar^2}{\mu a_0^2} \exp \left| -1 \left| 1 - \frac{\pi^2 N_1^2}{32} \right| \right|, \quad (6)$$

где берется верхний знак в случае $a_0 > \sqrt{ab}$ и нижний при $a_0 < \sqrt{ab}$.

1.1в. $a_0 \gg \sqrt{ab}$

Здесь в нулевом приближении получаем задачу о движении плоского осциллятора. Вычислив по теории возмущений поправку, вносимую кулоновским взаимодействием, для энергетических уровней трехмерной системы найдем:

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2 N_1^2}{8\mu b^2} + \frac{\hbar^2 \pi N_1}{2\mu ab} (N_2 + 1) + E_k^{(1)}, \quad (7)$$

где

$$E_k^{(1)} = -\frac{\hbar^2}{\mu a_0} \cdot \frac{\Gamma\left(|m_1| + \frac{1}{2}\right)}{|m_1|!} \lambda^{1/2} \times$$

$$\times \left\{ 1 + \sum_{s=0}^{\frac{N_2-|m_1|}{2}-1} \frac{(N_2-|m_1|)/2((N_2-|m_1|)/2-1) \cdots ((N_2-|m_1|)/2-S)}{((S+1)!)^2 \left(|m_1| + \frac{1}{2}\right) \left(|m_1| + \frac{3}{2}\right) \cdots \left(|m_1| + \frac{1}{2} + S\right)} \times \right. \\ \left. \times \left(-S - \frac{1}{2}\right) \left(-S + \frac{1}{2}\right) \cdots \left(S - \frac{1}{2}\right) \right\}, \quad (8)$$

$i = \frac{\pi N_1}{2ab}$, $N_2 = 0, 1, \dots$; m_1 — квантовые числа двумерного осциллятора.

причем величина $\frac{N_2-|m_1|}{2}$ должна быть целой неотрицательной, $\Gamma(x)$ — гамма функция.

В частности, для поправки к основному состоянию из (8) получим

$$E_0^{(1)} = - \frac{\hbar^2}{\mu a_0} \sqrt{\pi}, \quad (9)$$

а для низших возбужденных уровней ряд можно заменить его первым членом:

$$E_n^{(1)} \approx - \frac{\hbar^2}{\mu a_0} \cdot \frac{\Gamma(|m_1|+1/2)}{|m_1|!} i^{1/2} \left(1 - \frac{1}{2(2|m_1|+1)} \right). \quad (10)$$

Волновые функции в нулевом приближении представляются в виде произведения волновых функций одномерных стоячих волн и плоского осциллятора, а вклад кулоновского взаимодействия можно найти по теории возмущений.

При дальнейшем увеличении боровского радиуса относительно полюсов эллипсоида задача, очевидно, сведется к рассмотренной в п. 1.1 в.

1.2. $a \gg b \gg a_0$

В этом случае размерное квантование рассматривается как возмущение. Поэтому энергию системы можно представить в виде суммы энергетических спектров водородоподобного атома и свободной частицы в непроницаемом сильно сплюснутом эллипсоиде вращения [7]. Аналогичным образом определяются волновые функции.

1.3. $a \gg b \sim a_0$

Очевидно, что при данном условии трехмерную систему нельзя разложить на «быструю» и «медленную» подсистемы, вследствие чего адиабатическое приближение не применимо. Однако в случае, когда $\frac{b-a_0}{b} \approx 1+\beta$, где $|\beta| \ll 1$, можно, представив граничное условие в виде

$$\frac{x^2+y^2}{a_0^2} + \frac{z^2}{b^2} < 1, \quad (11)$$

т.к. в плоскости (x, y) локализация электрона происходит за счет кулоновского поля, свести задачу к рассмотренной в работе [8] (оп-

ределение энергетического спектра и волновых функций электрона в эллипсоидальном микрокристалле, мало отличающемся от сферического).

2. Сильно вытянутая эллипсоидальная потенциальная яма

Рассмотрим движение электрона в поле

$$U(x, y, z) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{\varepsilon(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}}, & \frac{x^2 + y^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2} < 1 \\ \infty, & \frac{x^2 + y^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2} > 1, \text{ где } b \gg a. \end{cases} \quad (12)$$

2.1. $b \gg a \gg a$

Тогда для «быстрой» подсистемы в нулевом приближении имеем движение в бесконечно глубокой двумерной потенциальной яме радиуса

$$a(z) = a \sqrt{1 - \frac{z^2}{b^2}} \quad (\text{см. [7]}). \quad (13)$$

Учитывая, что в низших состояниях $|z| \ll b$, и вид кулоновской поправки, для энергии двумерного движения имеем:

$$U_{n,M}(z) = \frac{\hbar^2 \alpha_{n+1,|M|}^2}{2\mu a^2} + \frac{\hbar^2 \alpha_{n+1,|M|}^2}{2\mu a^2 b^2} z^2 - \frac{\hbar^2 C_{n,M}^2}{\mu a b} \int_0^{a(z)} J_M^2 \left(\frac{\alpha_{n+1,|M|}}{a(z)} \rho \right) \frac{\rho d\rho}{\sqrt{\rho^2 + z^2}}, \quad (14)$$

где $n=0, 1, \dots$; M — квантовые числа задачи о свободном движении в двумерной круговой потенциальной яме, $\alpha_{n+1,|M|} > 0$ — $(n+1)$ -ый корень сферической функции Бесселя $J_M(\alpha_{n+1,|M|}) = 0$ в порядке возрастания; $C_{n,M}$ определяется из условия нормировки сферических бesselевых функций. Введем обозначение

$$a_0 = \min(a, \sqrt{ab}). \quad (15)$$

В случае возбужденных состояний $|z| \sim |a_0| \gg \rho$ и интеграл из (14) сведется к нормировочному. В основном состоянии $|z| \sim \rho$ и замена $\sqrt{\rho^2 + z^2}$ на $|z|$ недопустима. Этот случай требует отдельного рассмотрения.

Ниже ограничимся основным уровнем одномерного движения, относящегося к основному уровню движения в поперечной плоскости. Волновую функцию двумерного движения возьмем в виде

$$J_0 = C_{0,0} \left(1 - \frac{\bar{\rho}^2}{4} + \frac{\bar{\rho}^4}{64} - \frac{\bar{\rho}^6}{2304} \right), \quad (16)$$

где $\bar{\rho} = \frac{\alpha_{1,0}}{a(z)} \rho$, $\alpha_{1,0} \approx 2,4 \Rightarrow 0 \leq \bar{\rho} \leq 2,4$.

Из условия нормировки найдем

$$C_{0,0} = \frac{2,68}{a(z)}. \quad (17)$$

Заметим, что выбрав волновую функцию в виде (16), мы ограничились членами порядка 10^{-2} . Величину

$$\delta U(z) = U_{0,0}(z) - \frac{\hbar^2 z_{1,0}^2}{2\mu a^2} \quad (18)$$

можно рассматривать как возмущение, т. к.

$$|\delta U(z)| \ll \frac{\hbar^2}{\mu a^2}. \quad (19)$$

Тогда, согласно [6], основной уровень энергии трехмерного движения определится выражением

$$E_0 = \frac{\hbar^2 z_{1,0}^2}{2\mu a^2} - \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(\int_0^{a_0} \delta U(z) dz \right)^2. \quad (20)$$

здесь расходящийся интеграл обрезан сверху на расстояниях $|z| \sim a_0$. Выполнив интегрирование и разложив соответствующие биномы в ряд по степеням $\frac{a_0}{a} \ll 1$, для энергии основного состояния получим:

$$E_0 = \frac{\hbar^2 z_{1,0}^2}{2\mu a^2} - \frac{2\hbar^2}{\mu} \left(\frac{a_0^3}{a^2 b^2} - \frac{1}{a_0} \ln \frac{2a_0}{a} \right)^2. \quad (21)$$

Если $a_0 \ll \sqrt{ab}$ или $a_0 \sim \sqrt{ab}$, то выражение (21) упростится и примет вид

$$E_0 \approx \frac{\hbar^2 z_{1,0}^2}{2\mu a^2} - \frac{2\hbar^2}{\mu a_0^2} \cdot \ln^2 \frac{2a_0}{a}. \quad (22)$$

В случае $a_0 \gg \sqrt{ab}$ (21) сведется к виду

$$E_0 \approx \frac{\hbar^2 z_{1,0}^2}{2\mu a^2} + \frac{2\hbar^2}{\mu ab} \left(1 - \frac{\sqrt{ab}}{a_0} \ln 2 \sqrt{\frac{b}{a}} \right)^2, \quad (23)$$

где берется верхний знак, если выражение в скобках положительно, и нижний — если отрицательно.

Перейдем к рассмотрению возбужденных уровней трехмерной системы, не конкретизируя состояния двумерного движения «быстрой» подсистемы. Для этого нужно решить одномерное уравнение Шредингера в поле

$$U_{n,M}(z) = \frac{\hbar^2 z_{n+1,M}^2}{2\mu a^2} + \frac{\hbar^2 z_{n+1,M}^2}{2\mu a^2 b^2} z^2 - \frac{\hbar^2}{\mu a_0 |z|}, \quad (24)$$

где $n, M \neq 0$.

2.1а. $a_0 \ll \sqrt{ab}$

Пренебрегая вторым членом в (24), уравнение Шредингера для $z > 0$ сводится к виду, по форме совпадающему с уравнением для радиальных волновых функций S -состояний трехмерной кулонов-

кой задачи (см. [6]). При $z < 0$ волновые функции могут быть продолжены как $\Psi(z) = \Psi(-z)$ или $\Psi(z) = -\Psi(-z)$.

2.1б. $a_b \sim \sqrt{ab}$

Возбужденные состояния у «медленной» подсистемы в этом случае отсутствуют. Энергия основного состояния трехмерного движения задается выражением (22).

2.1в. $a_b \gg \sqrt{ab}$

При исследовании возбужденных состояний можно пренебречь в (24) кулоновским взаимодействием и получить задачу о движении одномерного осциллятора.

2.2. $b \sim a_b \gg a$

В этом случае для энергии основного состояния нельзя пользоваться формулой (23), т. к. она дает завышенное, почти в два раза, значение энергии для нулевого уровня однородного осциллятора. Поэтому основной уровень трехмерного движения нужно рассматривать совместно с возбужденными, согласно способу из п. 2.1. в.

При дальнейшем увеличении параметра относительно полуосей эллипсоида возникает ситуация, аналогичная рассмотренной в п. 2.2.

В случае $b \gg a \gg a_b$ поправка к спектру трехмерной кулоновской задачи представляет собой энергию движения свободного электрона в непроницаемом сильно вытянутом эллипсоиде вращения. Соответственно определится поправка к волновым функциям (см. [7]). Наконец, при $b \gg a \sim a_b$ ситуация аналогична рассмотренной в п. 1.3.

Отметим, что волновая функция трехмерной системы во всех случаях представится в виде произведения волновых функций «быстрой» и «медленной» подсистем.

3. Обсуждение результатов

Подводя итог вышеизложенному, заметим, что в полупроводниковых структурах с сильно сплюснутой или вытянутой эллипсоидальной формой (СС или ВЭФ) можно достичь полного снятия вырождения энергии примесных состояний, за исключением двукратного, являющегося следствием симметрии гамильтониана задачи относительно отражений $x \rightarrow -x$, $y \rightarrow -y$, $z \rightarrow -z$. Это приводит к появлению близко расположенных подуровней, обеспечивающих гибкость управления энергетическим спектром, о чем упоминалось в предисловии.

Другой особенностью систем с СС или ВЭФ является возможность получения на порядок бо́льших энергий, чем в сферических системах (микросталлах), при одинаковых объемах. Это видно из сравнения значений, задаваемых выражениями (4), (6), (7), (21), (22) или (23) для конкретных полупроводников, с результатами, полученными в работах [4] или [5].

При рассмотрении квазиуменьшенных объектов с сильно вытянутой эллипсоидальной формой возникает ситуация, аналогичная возникающей в известной задаче Эллиота, Лудона: вследствие быстрого

движения в поперечной плоскости, устраняется «провал» при одномерном движении в кулоновском поле. Различие состоит в том, что в данном случае роль магнитного поля играет размерное квантование. Как видно из выражения (22), если пренебречь намагничиваемостью среды, то положив формально $a=2a_0$ (a_0 — соответствующая магнитная длина), можно добиться совпадения результатов для энергий основного состояния (имеется в виду логарифмический член).

В заключение отметим, что все результаты настоящей работы имеют аналитический характер. Это значительно упростит дальнейшее исследование свойств рассмотренных систем, в частности, оптических.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. I. Ekimov et al. J. Luminesc., 46, 83 (1990).
2. A. I. Ekimov et al. J. Opt. Soc. Am. B., 10, 100 (1993).
3. M. Nirmal et al. Phys. Rev. Lett., 75, 3728 (1995).
4. D. S. Chuu, C. M. Hsiao, W. N. Mei. Phys. Rev. B., 46, 3898 (1992).
5. А. С. Гаспарян, Э. М. Казарян. Известия НАН Армении, Физика, 32, 83 (1997).
6. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика. М., Наука, 1974.
7. В. М. Галицкий, Б. М. Карнаков, В. И. Коган. Задачи по квантовой механике. М., Наука, 1992.
8. А. С. Гаспарян, Э. М. Казарян. Известия НАН Армении, Физика, 32, 130 (1997).

IMPURITY STATES IN QUASI-ZERO DIMENSIONAL SEMICONDUCTING STRUCTURES WITH HEAVILY FLATTENED (STRETCHED) ELLIPSOIDAL FORM

A. S. GASPARIAN, E. M. KAZARIAN

In the adiabatic approximation the analytic expressions are obtained for energy levels of the lower part of spectrum and corresponding electronic wave functions in a non-transparent semiconducting heavily flattened (stretched) ellipsoid of revolution in the center of which a hydrogen-like impurity is located. It is shown that in the considered structures it is possible to obtain energies by one order higher than in spherical ones having the same volumes and also there is a full removal of degeneracy of impurity states energy except of twofold one, connected with the modulus of two-dimensional orbital quantum number.

ԽԱՌՆՈՒՐԴԱՅԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԸ ԽԻՍ ՍԵՂՄՎԱԾ (ՉԳՎԱԾ) ԷԼԻՊՍԱՐԴԱՅԻՆ
ՉԵՎԻ ՔՎԱԶԻԶՐՈՉԱՓ ԿԻՍԱԼԱՂՈՐԴՉԱՅԻՆ ԿԱՌՈՅՎԱԾՔՆԵՐՈՒՄ

Ա. Ս. ԳԱՍՊԱՐԻԱՆ, Է. Մ. ԿԱԶԱՐԻԱՆ

Ադիաբատ մոտաձուրվյալում ստացված են էլեկտրոնի էներգիական սպեկտրի ստորին մակարդակների և համապատասխան ալիքային ֆունկցիաների անալիտիկ արտահայտություններ անթափանց կիսահղորդչային խիստ սեղմված (ձգված) պտտման էլիպսարդում, որի կենտրոնում տեղադրված է ջրածնանման խառնուրդ: Ցույց է տրված, որ զնգածե կառուցվածքների համեմատությամբ, դիտարկված մոդելում հնարավոր է կարգով մեծ էներգիաների ստացում (միեներյան ծավալի դեպքում), ինչպես նաև խառնուրդային վիճակների էներգիայի ալյասերման վերացում, բացառությամբ բոտ երկչափ ուղեբծային բվանտային թվի մոդուլի կրկնակի ալյասերման:

РЕЛЕЕВСКОЕ И КОМБИНАЦИОННОЕ РАССЕЯНИЕ СВЕТОВОГО ИМПУЛЬСА В ОДНОРОДНОЙ ГАЗОВОЙ СРЕДЕ

М. Л. ТЕР-МИКАЕЛЯН

Институт физических исследований НАН Армении

(Поступила в редакцию 8 апреля 1997г.)

В работе рассматривается релеевское и комбинационное рассеяние на двухуровневом атоме и в однородной газовой среде. Рассмотрение ведется в двух предельных случаях, допускающих простые аналитические решения (мгновенное и адиабатическое включения взаимодействия атомов с лазерным излучением). Показано, что релеевское рассеяние может наблюдаться и в бесконечной, однородной среде. Получены выражения для соответствующих вероятностей релеевского и комбинационного рассеяния в случае мгновенного включения взаимодействия.

1. Введение

Хорошо известно, что амплитуда релеевского рассеяния в однородной бесконечной среде в результате интерференции рассеяний на различных атомах зануляется по всем направлениям, кроме направления «вперед» (т.е. вдоль направления движения рассеиваемых фотонов), что и приводит к изменению скорости распространения света в среде. Релеевское рассеяние в бесконечной однородной среде может возникать только при наличии флуктуаций параметров среды (флуктуаций плотности, ориентаций молекул и т.д.). Этому направлению оптики, возникшему еще в прошлом веке, посвящена большая литература (см., например, [1]). В связи с успехами лазерной техники это направление получило большое развитие, новейшие достижения которого и история вопроса суммированы в обстоятельном обзоре [2]. Одновременно с изучением рассеяния света в макроскопических средах в последние годы начаты исследования по рассеянию лазерного излучения на отдельных атомах (см., например, [3], [4] и приведенную там литературу). Эти экспериментальные работы проводились в стационарном режиме, т.е. когда время действия лазерного излучения превышало время радиационного распада атома. Такие эксперименты выполняются обычно на атомных пучках, где время взаимодействия

$\sim \frac{l}{v_{ат}} \gg \gamma$ (l — пространственные размеры лазерного пучка, $v_{ат}$ — скорость атомов, γ — время радиационного распада). Они привели к открытию и изучению «трехпиковой» структуры в резонансной флуоресценции, а также к вынужденным процессам поглощения и излучения пробного поля системой «атом + поле излучения».

В настоящей работе рассмотрены процессы взаимодействия лазерных импульсов с отдельными атомами при обратном условии

$\tau < \gamma$, т.е. когда время взаимодействия меньше времени радиационного распада. Проанализированы процессы рассеяния и в бесконечной однородной газовой среде и показано, что некогерентное релеевское рассеяние не затухает и может быть экспериментально наблюде-
но. Аналогичные явления рассмотрены и для комбинационного рассеяния. Оказывается, что характеристики рассеяния зависят от временной структуры лазерного импульса, способа включения взаимодействия и параметра интенсивности a^2 .

2. Двухуровневый атом в поле лазерного импульса

Для простоты рассмотрим взаимодействие лазерного светового импульса с постоянной амплитудой, движущегося вдоль оси x с резким передним фронтом, что соответствует мгновенному включению взаимодействия в точке нахождения атома r_i в момент t_i (векторные величины в дальнейшем обозначаются жирным шрифтом):

$$E(x, t) = \varepsilon(t) e^{ikx - i\omega t} + \text{к.с.}, \quad (1)$$

$$\varepsilon(t) = \begin{cases} \varepsilon & \text{при } t > t_i, \\ 0 & \text{при } t < t_i. \end{cases} \quad (2)$$

В плоскости yz импульс для простоты предполагается безграничным. Решение уравнения Шредингера для i -го атома в поле импульса будем искать в виде разложения по полной ортонормированной системе функций невозмущенного двухуровневого атома:

$$\Psi_{1,2}^{(i)} = U_{1,2}^{(i)} e^{-iE_{1,2}t}, \quad \int \Psi_i^* \Psi_i dV = \delta_{i,k}. \quad (3)$$

Для двухуровневого атома волновая функция атома в поле импульса может быть представлена в виде

$$\Phi^{(i)} = a_1^{(i)} \Psi_1^{(i)} + a_2^{(i)} \Psi_2^{(i)}. \quad (4)$$

Коэффициенты разложения $a_{1,2}^{(i)}$ определяются из уравнения Шредингера

$$\begin{aligned} i a_1^{*(i)} - a_2^{(i)} V^* e^{-i\Delta(t-t_i) + ikx_i}, \\ i a_2^{*(i)} = a_1^{(i)} V e^{-i\Delta(t-t_i) + ikx_i}. \end{aligned} \quad (5)$$

При выводе уравнений (5) предполагалось, что расстройка резонанса удовлетворяет следующему условию:

$$\Delta = |E_{21} - \omega| < E_{21}, \quad (6)$$

где $E_{21} = E_2 - E_1$ и энергии атомных уровней E_2, E_1 измеряются в единицах сек^{-1} .

Взаимодействие электромагнитного поля с двухуровневым атомом, находящимся в точке с координатой r_i , определяется величиной V :

$$V = \frac{d_{21}^{(i)} \varepsilon}{\hbar} = \frac{|d\varepsilon|}{\hbar} e^{i(\tau + \varphi_1^{(i)} - \varphi_2^{(i)} + \tau)}, \quad (7)$$

где $\varphi_1^{(i)}$ и $\varphi_2^{(i)}$ — случайные фазы φ_1 и φ_2 ; φ — постоянная фаза z .

Электрический дипольный момент i -го атома, в дальнейшем обозначаемый через $d^{(i)}$, равен

$$d_{21}^{(i)} = \int \Psi_2^{(i)*} e r_{ie} \Psi_1^{(i)} dV_i = d^{(i)}. \quad (8)$$

Координата электрона r_{ie} отсчитывается от центра тяжести i -го атома. Поскольку в дальнейшем будет использоваться дипольное приближение, то $kr_{ie} \ll 1$. Однако множитель $\exp(ikr_{ie})$ в дальнейшем необходимо удерживать при рассмотрении интерференционных явлений между процессами, происходящими на различных атомах. При выводе уравнений (5) пренебрегалось всеми релаксационными процессами (столкновениями, радиационным затуханием, доплеровским уширением) и предполагалось, что в правой части уравнения (5) можно сохранить только резонансный член [5]). Эти ограничения, часть из которых в дальнейшем может быть снята, дают возможность использовать известное аналитическое решение о поведении двухуровневого атома в поле волны с резким передним фронтом (см., например, [6], где, однако, имеются опечатки, что сразу видно из приведенных в [6] волновых функций $\Phi_{1,2}$, которые не удовлетворяют условию ортонормированности). Правильные ортонормированные функции $\Phi_{1,2}^{(i)}$, удовлетворяющие начальным условиям, получаются при подстановке в выражение (4) следующих значений $a_{1,2}^{(i)}$:

$$a_1^i = \exp \left\{ -i \frac{\Delta}{2} (t - t_i) - i \frac{kx_i}{2} \right\} \left[\cos \frac{\Omega}{2} (t - t_i) + \frac{i\Delta}{\Omega} \sin(t - t_i) \right], \quad (9)$$

$$a_2^i = -\exp \left\{ -i \frac{\Delta}{2} (t - t_i) + i \frac{kx_i}{2} \right\} \left[\sin \frac{\Omega}{2} (t - t_i) \frac{2i(\Delta d)}{h\Omega} \right],$$

$$\text{где } \Omega = \sqrt{\Delta^2 + 4|V|^2}. \quad (10)$$

Волновые функции в этом случае можно представить в следующем виде:

$$\Phi_1^i = a_1^i \Psi_1 + a_2^i \Psi_2, \quad (11)$$

$$\Phi_2^i = -a_2^{i*} \Psi_1 + a_1^{i*} \Psi_2.$$

Волновые функции Φ_1^i и Φ_2^i удовлетворяют следующим начальным условиям:

$$\Phi_1^i \rightarrow \Psi_1 e^{-i \frac{kx_i}{2}} \text{ при } t \leq t_i, \quad (12)$$

$$\Phi_2^i \rightarrow \Psi_2 e^{-i \frac{kx_i}{2}} \text{ при } t \leq t_i.$$

Используя выражения (12), найдем дипольные электрические моменты в состояниях Φ_1^i и Φ_2^i соответственно. Рассмотрим вначале диполь-

ные моменты системы «атом+поле», когда состояние системы не меняется. Используя (9) и (12), для дипольного момента атома в резонансном поле

$$D_{11}^i = \int \Phi_1^{(i)} \mathbf{e} r \Phi_1^{(i)} dV, \quad (8')$$

получим

$$D_{11}^i(t > t_i) = -D_{22}^i = \frac{d^*(\mathbf{s}d)}{\hbar\Omega} e^{ikx_i} \left[\frac{\Delta}{\Omega} e^{-i(\omega(t-t_i))} - \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta}{\Omega} - 1 \right) e^{-i(\omega-\frac{\Omega}{2})(t-t_i)} - \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta}{\Omega} + 1 \right) e^{-i(\omega+\frac{\Omega}{2})(t-t_i)} \right] + \text{к.с.} \quad (13)$$

Отметим, что электрический дипольный момент (13) системы «атом+резонансное поле» i -го атома не зависит от случайных фаз атомных волновых функций φ_1 и φ_2 . Это условие приведет к тому, что при вычислении рассеяния в среде все атомы будут действовать когерентно, т.е. при вычислении рассеяния на совокупности атомов должны складываться амплитуды рассеяния на каждом атоме. Кроме когерентных переходов, когда волновые функции системы «атом+поле» не изменяются, возможны и переходы с изменением состояния системы. С помощью простого расчета можно прийти к следующему результату для электрического дипольного момента перехода $\Phi_1^{i_1} \leftrightarrow \Phi_2^{i_2}$:

$$D_{21}^i(t > t_i) = D_{12}^{i*}(t > t_i) = e^{ikx_i} d^* \left\{ \frac{2(\mathbf{s}d)^2}{\hbar^2\Omega^2} e^{-i\omega(t-t_i)} + \frac{(\mathbf{s}d)^2}{\hbar^2\Omega^2} [e^{-i(\omega+\frac{\Omega}{2})(t-t_i)} + \right. \\ \left. + e^{-i(\omega-\frac{\Omega}{2})(t-t_i)}] \right\} + e^{-ikx_i} d \left\{ 2 \left| \frac{\mathbf{s}d}{\hbar\Omega} \right|^2 e^{i\omega(t-t_i)} + \frac{1}{4} \left(1 + \frac{\Delta}{\Omega} \right)^2 e^{i(\omega+\frac{\Omega}{2})(t-t_i)} + \right. \\ \left. + \frac{1}{4} \left(1 - \frac{\Delta}{\Omega} \right)^2 e^{i(\omega-\frac{\Omega}{2})(t-t_i)} \right\}. \quad (14)$$

В этом случае дипольный момент перехода D_{21}^i зависит от случайных фаз атомных волновых функций и поэтому, как мы увидим ниже, рассеяния светового импульса на различных атомах не будут интерферировать друг с другом, т.е. при вычислении рассеяния на совокупности атомов должны складываться интенсивности рассеяния на каждом атоме, а не их амплитуды.

3. Рассеяние света в однородной среде

Для вычисления рассеяния света в среде мы применим следующий прием. Вначале рассчитываются электрические дипольные моменты атомов в поле движущегося светового импульса, а затем вычисляется излучение этих дипольных моментов. Таким образом, задача рассеяния света на двухуровневой системе сводится к расчету излучения наведенных дипольных моментов в резонансном поле дви-

жущегося светового импульса. Для расчета спонтанного излучения системой атомов в объеме V мы воспользуемся следующим выражением для вероятности спонтанного излучения фотона с частотой ω' , волновым вектором k' и поляризацией e' в телесный угол $d\Theta'$ [7]:

$$dW = \frac{\omega'^3}{2\pi\hbar c^3} \left| \sum_i e'^* D_i e^{ik' r_i} \right|^2 d\Theta'. \quad (15)$$

Выражение (15) при умножении на число фотонов с частотой ω' , k' , e'

$$n_{\omega'} = \frac{8\pi^3 c^3}{\hbar \omega'^3} I_{\omega k'}, \quad (15')$$

где $I_{\omega k'}$ — спектрально-угловая плотность интенсивности вынуждающего излучения

$$I = \int I_{\omega} d\omega = \int I_{\omega k'} d\Theta' d\omega, \quad (15'')$$

будет определять вынужденное излучение фотона ω' , k' , e' . При этом $d\Theta'$ в (15') будет определять телесный угол вынуждающего переход излучения $I_{\omega k'}$. Вероятность поглощения будет определяться тем же выражением, только вместо отрицательной частотной части дипольного момента «атом+резонансное поле» будет входить его положительная частотная часть.

Рассмотрим прежде всего когерентное релеевское излучение. Для этого в выражения (15) нужно подставить первое слагаемое выражения (13) и просуммировать по всем атомам среды в объеме рассеяния V . Легко заметить, что вынужденные процессы излучения и поглощения соответствующих фотонов, благодаря условию $D_{11}^- = D_{11}^{+*}$, будут компенсировать друг друга, а выражение для вероятности спонтанного процесса излучения примет вид

$$dW(\omega', k', e') = \frac{\omega^3}{8\pi\hbar c^3} |de'^*|^2 \frac{\alpha^2}{(1+\alpha^2)^2} d\Theta' \left| \sum_i e^{i(kx_i - k' r_i)} \right|^2. \quad (16)$$

Из (16) следует, что рассеяние существенным образом зависит от параметра интенсивности α .

В таблице приведены значения параметра $\alpha = \frac{2}{\hbar} \left| \frac{ed}{\Delta} \right|$ для различных интенсивностей лазерного излучения и различных расстройек $\tilde{\Delta}$ при $d = 5 \cdot 10^{-18}$ CGSE. Обратим внимание, что четвертая строка таблицы дает значение величины $2 \left| \frac{ed}{\hbar} \right| = 2|V|$ в обратных сантиметрах. Эта величина в литературе иногда называется частотой Раби и характеризует частоту осцилляций электрона между уровнями под действием сильного поля E (см., например, [1]). Для сравнения с экспериментальными данными удобнее пользоваться расстройкой $\tilde{\Delta} = \frac{\Delta}{2\pi c}$ в обратных сантиметрах. Величина $\tilde{\Delta} = \tilde{\nu}_{21} - \tilde{\nu}$, где частота атомного пере-

хода $\tilde{\nu}_{21} = \frac{E_{21}}{2\pi c}$ и частота линии возбуждения $\tilde{\nu} = \frac{\omega}{2\pi c}$ также выражены в обратных сантиметрах. Внутри области, ограниченной жирным контуром, $\alpha \geq 1$, и обычная теория возмущений неприменима.

Таблица

$I_{\omega k'} \tilde{\nu}_{\omega}$, Вт/см ²	1	10 ²	10 ³	10 ⁴	10 ⁵
$ E $, В/см	13,5	$4,3 \cdot 10^2$	$1,35 \cdot 10^3$	$4,3 \cdot 10^4$	$1,35 \cdot 10^5$
α	$\tilde{\Delta} = 10^{-2} \text{ см}^{-1}$	2,25	72,4	$2,25 \cdot 10^3$	$7,24 \cdot 10^4$
	$\tilde{\Delta} = 1 \text{ см}^{-1}$	$2,25 \cdot 10^{-3}$	$7,24 \cdot 10^{-2}$	2,25	72,4
	$\tilde{\Delta} = 10 \text{ см}^{-1}$	$2,25 \cdot 10^{-4}$	$7,24 \cdot 10^{-3}$	$2,25 \cdot 10^{-1}$	7,24

Легко видеть, что из-за последнего множителя в выражении (16) когерентное релеевское рассеяние в безграничной среде зануляется. В ограниченной же среде, например, в самом простом случае среды, состоящей из двух двухуровневых атомов, расположенных в точках r_1 и $r_1 + L$, интерференционный член дает $|1 + e^{i(k-k')L}|^2 = 2[1 + \cos(k - k')L]$, что и определяет обычную интерференционную картину рассеяния света на двух центрах. При $\alpha^2 \ll 1$ мы имеем результаты обычной теории возмущения, при $\alpha^2 \gg 1$ выражения (16) учитывают эффект «насыщения». В общем случае ограниченной среды когерентное усиление, пропорциональное квадрату числа атомов, будет наблюдаться в направлениях рассеяния на когерентной длине $L_{\text{ког}}$, удовлетворяющей условию $(k - k')L_{\text{ког}} \ll 1$. Однако в безграничной среде амплитуда релеевского рассеяния зануляется, кроме рассеяния вперед, когда $k' = k$.

Аналогичные результаты можно получить при спонтанном излучении фотонов с частотами $\omega \pm \Omega$. Приведем для примера выражения для вероятностей рассеяния на одном атоме:

$$dW(\omega \mp \Omega, e') = \frac{(\omega \mp \Omega)^2}{32\pi\hbar c} |de'|^2 \frac{a^2}{(1+a^2)^2} [\sin \Delta \mp \sqrt{1+a^2}]^2 d\theta'. \quad (17)$$

Интерференционный член имеет тот же вид, что и в выражении (15), и его анализ проводится аналогично предыдущему.

Другие физические результаты получаются при расчете некогерентного излучения фотонов ω , $\omega \pm \Omega$ которое связано с дипольным «моментом» перехода D_{21} . Поскольку дипольный момент D_{21}^i для каждого атома зависит от произвольных фаз волновых функций φ_1^i , φ_2^i , то при рассмотрении суммарного излучения от всех атомов необходимо усреднить выражение по произвольным случайным фазам. Это приводит к замене интерференционного множителя, входящего в (16), на N , где N есть полное число атомов в рассеивающем объеме. Кро-

ме того, нужно обратить внимание, что из выражения (14) следует, что вынужденные процессы излучения и поглощения на частотах $\omega \pm \Omega$ не компенсируют друг друга, поскольку коэффициенты при соответствующих экспоненциальных множителях, отвечающих излучению $e^{-(\omega \pm \Omega)(t-t_i)}$ и поглощению $e^{(\omega \pm \Omega)(t-t_i)}$, различны. В результате расчета вероятностей некогерентного излучения фотонов ω , $\omega \pm \Omega$ в объеме с числом атомов, равным N , вероятность принимает вид

$$dW(\omega, e) = N \frac{\omega^3}{8\pi\epsilon_0 c^2} |de^{*e}|^2 \frac{\alpha^4}{(1+\alpha^2)^2} d\Theta', \quad (18)$$

$$dW(\omega \mp \Omega, e') = N \frac{(\omega \mp \Omega)^3}{32\pi\epsilon_0 c^2} \frac{|de'|^2}{(1+\alpha^2)^2} [\alpha^4(n'+1) - (\text{sign} \Delta \mp \sqrt{1+\alpha^2})^4 n'] d\Theta'. \quad (19)$$

Заметим, что выражение (19) при некоторых значениях параметров может принимать отрицательные значения. Это будет означать, что происходит поглощение, а не излучение. Отметим, что сумма выражений (16) и (18) в случае рассеяния на одном атоме приводит к формуле для полного релеевского (несмещенного) рассеяния [8]

$$dW = dW_{\text{кор}} + dW_{\text{некор}} = \frac{\omega^3}{8\pi\hbar c^3} \frac{|d\mathbf{e}'|^2}{(1+\alpha^2)} d\Theta'. \quad (20)$$

Выражение (20) при $\alpha^2 \ll 1$ совпадает с известным выражением Крамерса-Гейзенберга для несмещенного релеевского рассеяния в случае двухуровневой системы. При $\alpha^2 \gg 1$ $dW \sim dW_{\text{некор}}$ и порядка вероятности спонтанного излучения невозмущенного полем атома.

Приведенные выше выражения для рассеяния квантов на отдельном атоме или в однородной среде относились к специальному способу включения взаимодействия, когда можно использовать простые аналитические решения. Очевидно, что мгновенное включение, т.е. импульс с бесконечно резким фронтом, является идеализацией экспериментальной ситуации. Однако можно показать, что характерным временем включения τ , при котором приведенные в тексте результаты сохранят свой вид, является величина $|\Delta|^{-1}$, которая должна удовлетворять условию $\tau \leq \frac{1}{|\Delta|}$. Вообще говоря, метод, использованный нами при расчете рассеяния, должен быть несколько уточнен, поскольку выражения (13) и (14) справедливы при $t > t_i$. Поэтому наведенные дипольные моменты D_{11} и D_{22} при разложении в интеграл Фурье по времени будут еще иметь некоторую «размазку» частот ω и $\omega \pm \Omega$ порядка τ^{-1} , что не сильно меняет результат.

Можно рассмотреть и другой предельный случай рассеяния на отдельном атоме, когда взаимодействие включается адиабатически, т.е. $\tau \gg \frac{1}{|\Delta|}$. Причем в этом случае можно учесть и влияние радиационного затухания [9], т.е. распространить формализм квазиэнергетических функций на стационарный режим, когда $\tau > \gamma$. При этом в

[9] получены результаты, совпадающие с расчетами резонансной флуоресценции [4]. Оказывается, что результаты при адиабатическом включении взаимодействия резко отличаются от рассмотренных выше результатов при мгновенном включении, поскольку при адиабатическом включении все релеевские рассеяния являются когерентными и, следовательно, релеевское рассеяние в однородной среде за нуляется. Сумма вероятностей когерентного и некогерентного релеевского рассеяния при мгновенном включении взаимодействия (20), т.е. полное сечение рассеяний на несмещенной частоте совпадает с сечением релеевского рассеяния в случае адиабатического включения. Можно получить аналитические решения задачи и для целого класса импульсов со специально подобранной зависимостью формы импульса от времени, допускающей решение уравнений (5), и убедиться, что процессы рассеяния на двухуровневых системах в однородной среде будут определяться формой импульса и способом включения взаимодействия.

Работа выполнена в рамках темы 96—772, финансируемой из государственных централизованных источников РА, а также по гранту № 170 ер Международного научного фонда.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Электродинамика сплошных сред. М., Наука, 1974.
2. И. Л. Фабелинский. УФН, 164, 897 (1994).
3. H. Walther, W. Hartig, W. Rasmussen, R. Schider. Zeit. Phys. A, 278, 205 (1976).
4. R. Grove, F. Wu, S. Ezekiel, Phys. Rev. A, 15, 227 (1977).
5. М. Л. Тер-Микаелян. «Резонансная нелинейная оптика», Препринт ИФИ АН Армении, №74—11, Ереван, 1974.
6. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика, §41, М., Наука, 1974.
7. В. Гайтлер. Квантовая теория излучения. М., Инстр. лит., 1956.
8. М. Л. Тер-Микаелян, А. О. Меликян. ЖЭТФ, 58, 281 (1970).
9. B. V. Kryzhanovsky, A. O. Melikyan. Opt. Comm., 29, 164 (1979).

RAYLEIGH AND COMBINATIONAL SCATTERINGS OF LIGHT PULSE IN A HOMOGENEOUS GASEOUS MEDIUM

M. L. TER-MIKAELIAN

The Rayleigh and combinational scatterings on a two-level atom in a homogeneous gaseous medium are considered in two limiting cases when analytical solutions are possible. Analytical expressions for the corresponding probabilities of the Rayleigh and combinational scatterings are obtained for the case of a non-stationary switching on of the interaction.

УДК 537.50

НОВЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА ЭФФЕКТИВНОСТИ ВОЗБУЖДЕНИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ УРОВНЕЙ МОЛЕКУЛ В ГАЗОВЫХ СМЕСЯХ

Р. В. ЧИФЛИКЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 22 апреля 1997г.)

Данный подход основан на прямом использовании зависимостей дрейфовых скоростей электронов, приведенных напряженностей электрических полей и долей вкладываемых мощностей разряда в колебательные уровни молекул в функции от средней энергии электронов в чистых однокомпонентных газах, составляющих данную смесь. Данный метод справедлив для средних энергий электронов в области 1—2 эВ и имеет точность 5—10%.

1. Выходная мощность и эффективность газовых лазеров, лазерных усилителей и т. п. определяются, в частности долей энергии электрического поля, поступающей в колебательные степени молекул CO_2 , CO и N_2 [1]. Баланс энергии электронов в газовых смесях в электрическом разряде традиционно определяется численным решением уравнения Больцмана для функции распределения электронов по энергиям (ФРЭЭ) [2]. Однако, численные методы, наряду со своими неоспоримыми преимуществами, обладают также рядом недостатков. Так, например, результаты, полученные для смеси одного состава, не могут непосредственно быть использованы для других; оптимизация смесей по тем или иным характеристикам представляет сложную вычислительную задачу; необходима полная информация о сечениях упругих и неупругих электрон-молекулярных соударений, что не всегда хорошо известно и т. д.

В данной работе предлагается простое приближенно-аналитическое соотношение, напрямую связывающее между собой доли энергии электрического поля, идущей в колебательные степени молекул в произвольной газовой смеси и составляющих ее чистых газов. В основе данной формулы лежит подход, разработанный в [3], где дрейфовые скорости электронов и приведенные напряженности электрических полей в чистых газах и их произвольных смесях непосредственно связаны друг с другом. Этот подход основан на слабой чувствительности связи между кинетическими коэффициентами электронов и параметрами элементарных процессов электрон-молекулярных соударений к виду ФРЭЭ. В качестве единственного параметра, характеризующего константы скоростей всех элементарных процессов, которые определяют баланс энергии электронов в газовых смесях, принимается средняя энергия электронов. Диапазон изменения средних энергий электронов (1—3 эВ) выбирается таким, что процессы возбуждения электронных состояний молекул, а также их диссоциация и ионизация не

дают заметного вклада в баланс энергии электронов. При этом отпадает необходимость в численном решении кинетического уравнения. Подробное обоснование данного подхода приводится в [4].

2. Согласно [3], дрейфовые скорости электронов и приведенные напряженности электрических полей в произвольных газовых смесях однозначно связаны следующим соотношением:

$$\sum_{j=1}^N p_j e_j w_j^{\pm 1} = 1, \quad (1)$$

где p_j — парциальное давление j -ого компонента, $e_j = \bar{E}_j(U)/\bar{E}(U)$, где $\bar{E}_j(U)$ и $\bar{E}(U)$ — приведенные напряженности электрических полей в газе j -ого сорта и смеси, соответственно; $w_j = W_j(U)/W(U)$, где $W_j(U)$ и $W(U)$ — дрейфовые скорости электронов в газе j -ого сорта и смеси, соответственно; N — число компонентов в данной смеси; U — средняя энергия электронов.

Как следует из (1),

$$\bar{E}W = \sum_{j=1}^N p_j \bar{E}_j W_j. \quad (2)$$

Данное соотношение означает, что полная мощность разряда, вкладываемая в электронный газ, равна сумме парциальных мощностей в соответствующих чистых газах, составляющих данную смесь. Отметим, что значения $\bar{E}_j$, W_j , $\bar{E}$ и W берутся при одном и том же значении средней энергии электронов U .

Как известно, эффективность возбуждения колебательных уровней молекул определяется вкладываемой в них долей мощности разряда $\delta_j = \delta_j(U)$ [2]. Следовательно, мощность разряда, вкладываемая в возбуждение колебательных уровней молекул j -ого сорта, равна $p_j \bar{E}_j W_j \delta_j$. Тогда искомый относительный вклад этого канала диссипации энергии будет определяться долей вкладываемой энергии $\delta_j^* = \delta_j^*(U)$, определяемой как

$$\delta_j^*(U) = \frac{p_j \bar{E}_j W_j}{\bar{E}W} \delta_j. \quad (3)$$

3. Точность формулы (3) проверялась нами для смеси $CO:CO_2 = 1:1$ [2]. Зависимости $\bar{E}_1 = \bar{E}_1(U)$, $W_1 = W_1(U)$ и $\delta_1 = \delta_1(U)$ для CO брались из [5]; для CO_2 зависимости $\bar{E}_2 = \bar{E}_2(U)$ и $W_2 = W_2(U)$ брались из [2, 6], а $\delta_2 = \delta_2(U)$ — из [7]. Результаты сравнений приводятся в Таблице.

На рисунке для различных составов газовых смесей $CO_2:N_2:He$ (1:2:3, 4:1:12, 1:7:30 и 1:7:0) приводятся зависимости долей мощности разряда $\delta^* = \delta^*(U)$, идущих на возбуждение антисимметрической моды CO_2 и колебательной моды N_2 . Сплошные кривые рассчитаны по (3), а штриховые — получены численным счетом в [8]. В расчетах по (3) нами использовались результаты численных расчетов, взятых из следующих работ: зависимости $\bar{E}_1 = \bar{E}_1(U)$ и $W_1 = W_1(U)$

для CO_2 брались из [2, 6, 9], $\delta_1 = \delta_1(U)$ — из [7]; зависимости $\tilde{E}_2 = \tilde{E}_2(U)$, $W_2 = W_2(U)$ и $\delta_2 = \delta_2(U)$ для N_2 брались из [10]; зависимости $\tilde{E}_3 = \tilde{E}_3(U)$ и $W_3 = W_3(U)$ для He — из [11].

ТАБЛИЦА. Расчетные значения доли мощности разряда, идущей на возбуждение колебательных мод CO_2 и CO в смеси $\text{CO}:\text{CO}_2 = 1:1$ в зависимости от средней энергии электронов U . ($1\text{Td} \equiv 10^{-17} \text{В} \cdot \text{см}^2$).

	U , эВ	1,10	1,50	2,25	3,00
CO	$\tilde{E}_1$, Тд	68,9	90,3	117	150
	W_1 , 10^5см/с	76,1	105	143	177
	δ_1 , %	86,0	71,9	50,0	34,2
CO_2	$\tilde{E}_2$, Тд	30,0	36,8	56,0	77,4
	W_2 , 10^5см/с	84,2	94,2	122	143
	δ_2 , %	60,5	48,2	30,9	19,1
Смесь, ф-ла (3)	δ_1^* , %	58,0	52,7	35,5	24,1
	δ_2^* , %	19,7	12,9	8,96	5,61
	$\delta_1^* + \delta_2^*$, %	77,7	65,6	44,5	29,8
Смесь, числен- ный расчет [2]	δ_1^* , %	60,0	50,0	32,7	25,5
	δ_2^* , %	18,6	13,6	7,73	6,36
	$\delta_1^* + \delta_2^*$, %	78,6	63,6	40,4	31,9

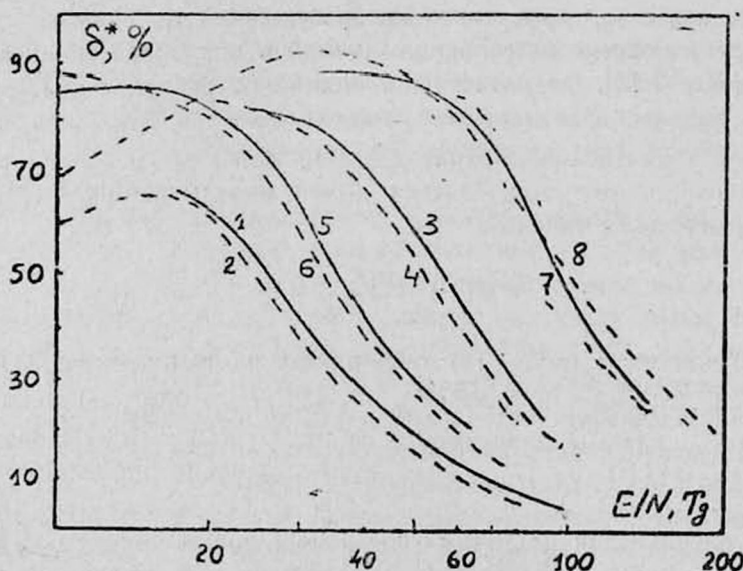


Рис. 1. Расчетные значения доли мощности разряда, идущей на возбуждение антисимметричной моды CO_2 и колебательной моды N_2 , в зависимости от E/N для различных составов лазерной смеси $\text{CO}_2:\text{N}_2:\text{He}$. 1—4:1:12—по (3), 2—4:1:12—из [8]; 3—1:2:3—по (3), 4—1:2:3—из [8]; 5—1:7:30—по (3), 6—1:7:30—из [8]; 7—1:7:0—по (3), 8—1:7:0—из [8]. ($1\text{Td} \equiv 10^{-17} \text{В} \cdot \text{см}^2$).

Как видно из вышеприведенных примеров, погрешность формулы (3) не превышает 5—10%, что позволяет использовать ее для оперативных расчетов эффективностей возбуждения колебательных уровней молекул CO , CO_2 , N_2 в произвольных многокомпонентных газовых смесях. Для этого необходимо иметь достаточно полный банк данных по зависимостям дрейфовых скоростей электронов, приведенных напряженностей электрических полей и эффективностей возбуждения колебательных уровней молекул от средней энергии электронов в чистых однокомпонентных газах, составляющих данную смесь. Использование формулы (3) требует гораздо меньших затрат машинного времени по сравнению с подходом, основанным на численном решении уравнения Больцмана, особенно в смесях, где $N \gg 1$.

ЛИТЕРАТУРА

1. У. Т. Лиланд. В кн.: Газовые лазеры. Под ред. И. Мак-Даниеля и У. Нигэна, М., Мир, 1986.
2. W. L. Nighan. Phys. Rev. A2, 1989 (1970).
3. R. V. Chiflikian. Phys. Plasmas, 2, 3902 (1995).
4. А. В. Елецкий. Физика плазмы, 3, 657 (1977).
5. Н. Л. Александров, А. М. Кончаков, Э. Е. Сои. ЖТФ, 49, 1194 (1979).
6. J. W. Gelagher, E. C. Beaty, J. Dutton, L. C. Pitchford. J. Phys. Chem. Ref. Data, 12, 109 (1983).
7. А. Н. Лобанов, Я. Ф. Сучков. Квант. электр., 1, 1527 (1974).
8. J. J. Lowke, A. V. Phelps, B. W. Irwin. J. Appl. Phys., 44, 4664 (1973).
9. В. А. Пивовар, Т. Д. Сидорова. ЖТФ, 49, 1425 (1979).
10. Н. Л. Александров, А. М. Кончаков, Э. Е. Сои. Физика плазмы, 4, 169 (1978).
11. A. J. Davies, J. Dutton, G. J. Evans, et al. J. Phys. D: Appl. Phys., 17, 287 (1984).

A NEW METHOD FOR CALCULATION OF EXCITATION EFFICIENCY OF VIBRATIONAL LEVELS OF MOLECULES IN GAS MIXTURES

R. V. CHIFLIKIAN

This approach is based on the direct use of dependences of drift velocities of electrons, reduced electric fields, and fractions of discharge energy delivered to vibrational states of molecules as a function of the mean electron energy in single gases composing a given mixture.

ԳԱԶԱՅԻՆ ԽԱՌՆՈՒՐԴՆԵՐՈՒՄ ՄՈԼԵԿՈՒԼՆԵՐԻ ՏԱՏԱՆՈՂԱԿԱՆ ՄԱԿԱՐԴԱԿՆԵՐԻ ԳՐԳՈՄԱՆ ԱՐԴՅՈՒՆԱՎԵՏՈՒԹՅԱՆ ՀԱՇՎԱՐԿԻ ՆՈՐ ՄԵԹՈԴ

Ռ. Վ. ՉԻԼԻԿԻԱՆ

Տղլալ մոտեցումը հիմնված է մոլեկուլների տատանողական մակարդակների մեջ էլեկտրոնների տեղաշարժի արագությունների, էլեկտրական դաշտերի լարվածությունների և պարպումի հզորությունների ներդրվող մասի կախումների ուղղակի ոգտադորման վրա:

МАГНИТНЫЕ ПОЛЯ, ВОЗБУЖДАЕМЫЕ ИОНОСФЕРНЫМИ
ВЕТРАМИ ВО ВНУТРЕННИХ СЛОЯХ ЗЕМЛИ

Ю. С. ВАРДАНЯН

Институт радиофизики и электроники НАН Армении

(Поступила в редакцию 4 апреля 1997г.)

В работе приводятся аналитические выражения магнитных полей, возбуждаемых ионосферными ветрами во внутренних слоях Земли.

В работе [1] показано, что ионосферные ветры могут возбудить электромагнитные процессы в недрах Земли. В частности, рассчитаны возбуждаемые ионосферными ветрами электрические поля и токи в каждом из слоев внутреннего строения Земли. Однако известно, что большой научный и практический интерес представляют и создаваемые ими магнитные поля.

Магнитные поля определяются из уравнения $\text{roth} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}$, которое определяет $\mathbf{h}$ с точностью до градиента произвольной функции φ , удовлетворяющей уравнению Лапласа, поскольку $\text{div} \mathbf{h} = 0$. Тогда выбором определенной функции φ можно в отсутствие поверхностных токов, которое предполагается по постановке задачи, удовлетворить граничным условиям непрерывного перехода магнитного поля $\mathbf{h}$ из одного слоя в другой. Здесь необходимо отметить, что магнитные поля во внутренних слоях Земли по замыслу задачи должны сшиваться с магнитными полями в околоземном пространстве, генерируемыми теми же ионосферными ветрами (динамо-ветрами). Газовая оболочка Земли считается немагнитной средой, и в работе [2] для магнитных полей в околоземном космическом пространстве использовано обозначение $\mathbf{h}$. Поэтому это обозначение для единообразия сохранено (написав $\text{roth} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}$, $\text{div} \mathbf{h} = 0$) и в настоящей работе для магнитных полей в недрах Земли, где пренебрегаем вектором намагничивания и под $\mathbf{h}$ понимаем индукцию магнитного поля (такой метод принят в научной литературе, см. [3]).

Напомним, что в работе [2] ионосферные ветры представлены мелкомасштабным (по сравнению с радиусом Земли) горизонтальным движением нейтральной компоненты слабоионизованной ионосферной плазмы со скоростью $\mathbf{W} = (W_x, W_y, 0)$, не зависящей от z и удовлетворяющей уравнению несжимаемой жидкости $\text{div} \mathbf{W} = 0$. При этом пара компонент Фурье-разложения W_x и W_y по координатам x, y с учетом уравнения непрерывности несжимаемой жидкости выбрана в виде

$$W_x = \Lambda \frac{W_0}{k_1} \sin k_1 x \cdot \sin k_2 y, \quad W_y = \Lambda \frac{W_0}{k_2} \cos k_1 x \cdot \cos k_2 y, \quad (1)$$

где множитель $\Lambda = 1$ при коврашении (когда движение нейтрального газа в ионосфере северного и южного полушарий одинаково) и $\Lambda = -\operatorname{sgn} z$ при антиврашении (когда движение нейтрального газа в ионосфере северного и южного полушарий противоположно), $\operatorname{sgn} z$ — разрывная функция:

$$\operatorname{sgn} z = \begin{cases} 1, & z > 0, \\ -1, & z < 0. \end{cases}$$

$\frac{W_0}{k_{1,2}}$ — амплитуды скорости, $k_{1,2}$ — величины, входящие в Фурье-разложения и определяющие периоды скорости по x , y и размеры бенаровских ячеек, равные $\frac{\pi}{k_{1,2}}$. Другие пары членов Фурье-разложения можно привести к виду (1) соответствующей заменой переменных [4].

Заметим, что в ионосфере такое геострофическое ($W_z = 0$), типа бенаровских ячеек мелкомасштабное (по сравнению с радиусом Земли) движение нейтрального газа экспериментально было обнаружено в [4]. Механизм образования таких движений связан с неравномерным нагревом ионосферы на дневной и ночной стороне (и вследствие этого с возникновением градиента давления, перпендикулярного силе тяготения) и вращением Земли [4, 5].

Таким образом, малость характерных размеров изучаемого явления (по сравнению с радиусом Земли) позволяет применить плоскую геометрическую модель для всей системы, охватывающей околоземное космическое пространство и внутренние слои Земли [1, 2].

Возбуждаемые ионосферными ветрами электрические токи в земных слоях представляются в общем виде

$$j = \sigma_{||} E_{||} + \sigma_p E_{\perp} + \sigma_H \frac{[HE]}{H}, \quad (2)$$

где $E_{||}$, $E_{\perp}$ — компоненты электрического поля, направленные вдоль и перпендикулярно магнитному полю, H — магнитное поле Земли, $\sigma_{||}$ и σ_p , σ_H — соответственно продольная проводимость и проводимости Педерсена, Холла. Уравнение (2) с соответствующими значениями проводимостей относятся ко всем слоям Земли (в том числе и к твердой части ядра, с определенными оговорками), кроме внешнего жидкого слоя ядра, который принимается бесконечно электропроводящим и описывается уравнением Эйлера $\nabla^2 p = \frac{1}{c} [jH]$ [1]. Отсюда видно, что в из-

бранной прямоугольной системе координат, ось z которой направлена по магнитному полю Земли [2], ток j в жидком слое не зависит от z , и горизонтальные токи при антивращении, когда потенциал электрического поля является нечетной функцией, равны нулю, и ток направлен вдоль линии магнитного поля H и равен значению j_z на границе

мантия—жидкое ядро. При коврашении потенциал электрического поля является четной функцией, и поскольку ток в жидком ядре не зависит от z , то на границе мантия—жидкое ядро $j_z = 0$. Твердая часть ядра считается высокопроводящим однородным шаром (состоящим из атомов железа), где можно пренебречь горизонтальными токами, т.е. токи считаются текущими вдоль силовых линий магнитного поля Земли, совпадающими с нормальными токами в жидкой части ядра [1].

В данной статье с учетом вышеизложенного приводятся аналитические выражения магнитных полей, создаваемых электрическими токами во внутренних слоях Земли. Естественно, они определяются из уравнения $-\Delta h = \frac{4\pi}{c} \text{rot} j$. Электрические токи j имеют вид (7) работы [1]. Тогда правая часть уравнения, расписанная по координатным осям x, y, z , будет иметь следующий вид:

$$\frac{\partial j_x}{\partial y} - \frac{\partial j_y}{\partial z} = \left[k_2 \sqrt{\sigma_p \sigma_{||}} B_2(\xi) \right]_z - k_2 \sqrt{\frac{\sigma_p}{\sigma_{||}}} (\sigma_p B_2(\xi))_z \cdot \sin k_1 x \cdot \sin k_2 y +$$

$$+ k_1 \sqrt{\frac{\sigma_p}{\sigma_{||}}} (\sigma_H B_2(\xi))_z \cdot \cos k_1 x \cdot \cos k_2 y, \quad (3)$$

$$\frac{\partial j_y}{\partial x} - \frac{\partial j_x}{\partial y} = [k_1^2 (\sigma_H - \sigma_p) B_2(\xi)] \cdot \sin k_1 x \cdot \cos k_2 y +$$

$$+ [-k_1 k_2 (\sigma_p + \sigma_H) B_2(\xi)] \cdot \cos k_1 x \cdot \sin k_2 y, \quad (4)$$

$$\frac{\partial j_x}{\partial z} - \frac{\partial j_z}{\partial x} = \left[-k_1 \sqrt{\frac{\sigma_p}{\sigma_{||}}} (\sigma_p B_2(\xi))_z + k_1 \sqrt{\sigma_p \sigma_{||}} B_2(\xi) \right] \cdot \cos k_1 x \cdot \cos k_2 y +$$

$$+ \left[-k_2 \sqrt{\frac{\sigma_p}{\sigma_{||}}} (\sigma_H B_2(\xi))_z \right] \cdot \sin k_1 x \cdot \sin k_2 y, \quad (5)$$

где $B_2(\xi) = e^{-\frac{m}{2}\xi} (A_1 e^{i\xi} + A_2 e^{-i\xi})$, $t = \frac{1}{2} \sqrt{m^2 + 4k^2}$, $k^2 = k_1^2 + k_2^2$, $A_{1,2}$ —

соответственно произвольные постоянные (вообще говоря, разные для каждого слоя), которые определяются из граничных условий непрерывности потенциала электрического поля и нормальных составляющих электрического тока на границах раздела между слоями, m —постоянная аппроксимации выражения $\sigma_m = \sqrt{\sigma_{||} \sigma_p}$ экспоненциальной функцией $\sigma_m = \sigma_0 e^{m\xi}$.

Далее нетрудно показать, что при аппроксимации проводимостей $\sigma_{||}$, σ_p , σ_H экспоненциальной функцией от z переход к новой переменной ξ , где $\sqrt{\sigma_{||} \sigma_p} = \sigma_0 e^{m\xi}$, производится линейным преобразованием. Следовательно, выражения (3), (4), (5) будут суммой произведений известных экспоненциальных функций от z и соответствующих тригонометрических функций вида $a_i e^{b_i z} \exp(i(k_1 x + k_2 y))$, где a_i , b_i —определенные постоянные величины, входящие в правую часть уравнения

для магнитного поля и разные для коры и мантии Земли. Тогда частное решение для компонент поля $h_{x,y,z}$ легко находится в виде

$$h_{x,y,z} = \frac{4\pi}{c} a_{ix,y,z} \cdot \frac{e^{b_i z}}{(k^2 - b_{ix,y,z}^2)} \cdot \exp i(k_1 x + k_2 y), \quad (6)$$

где $a_{ix,y,z}$, $b_{ix,y,z}$ — коэффициенты, соответствующие разным компонентам поля.

Общее решение однородного уравнения, разложенное по компонентам $h_{x,y,z}$, будет иметь вид:

$$h_{x,y,z} = (A_{1x,y,z} e^{k|z|} + A_{2x,y,z} e^{-k|z|}) \exp i(k_1 x + k_2 y), \quad (7)$$

где $A_{1x,y,z}$, $A_{2x,y,z}$ — неопределенные коэффициенты, которые определяются из граничных условий непрерывности магнитного поля между слоями, относятся соответственно к разным компонентам поля и разные для коры и мантии. Естественно, сумма (6) и (7) будет общим решением для уравнения поля h в коре и мантии.

Как сказано выше, при антивращении токи в жидком и твердом ядре направлены по оси z и равны значению j_z на границе мантия — жидкое ядро, а при ковращении токи в жидком и твердом ядре равны нулю. Тогда при антивращении, когда горизонтальные токи j_x , j_y и члены, содержащие производные по z , равны нулю, и при ковращении, когда отсутствуют токи, выражения (3), (4), (5) и уравнения для поля h будут такого же типа, что и в случае коры и мантии. Это обстоятельство позволяет производить унифицированную запись магнитных полей, индуцируемых ионосферными ветрами, во всей слоистой земной толще. Приведем эту запись в общем виде, не конкретизируя данные для каждого слоя в отдельности, так как подробные математические выражения в основном представляют интерес для практического применения.

Итак, создаваемые поля имеют вид

$$h_{x,y,z} = \frac{4\pi}{c} a_{ix,y,z} \cdot \frac{e^{b_i z}}{(k^2 - b_{ix,y,z}^2)} \cdot \exp i(k_1 x + k_2 y) + \\ + (A_{1x,y,z} e^{k|z|} + A_{2x,y,z} e^{-k|z|}) \exp i(k_1 x + k_2 y). \quad (8)$$

Как видно из формулы (8), магнитные поля имеют периодическую структуру, поскольку электродинамическое состояние во всем рассматриваемом объеме определяется периодическим, типа бенаровских ячеек движением нейтрального газа в ионосфере. Причем формула (8) получена при условии, когда характерные размеры изучаемого явления малы по сравнению с радиусом Земли и можно применить плоскую геометрическую модель. Однако все сказанное относится к высоким широтам, когда можно пренебречь горизонтальной составляющей магнитного поля Земли и считать его перпендикулярным к границам раздела между плоскими слоями внутреннего строения Земли.

Для того, чтобы использовать формулу (8) для конкретных практических задач, необходимо напомнить, что задача, охватывающая

околоземное космическое пространство [2] и внутренние слои Земли [1], рассматривается в прямоугольной системе координат, где ось z направлена по магнитному полю Земли и плоскость $z=0$ проходит через середину магнитосферы [1, 2].

ЛИТЕРАТУРА

1. Ю. С. Варданын. Известия НАН Армении. Физика, 30, 261 (1995).
2. Ю. С. Варданын. Известия АН Арм.ССР. Физика, 27, 163 (1992).
3. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Электродинамика сплошных сред. М., Наука, 1982.
4. Л. М. Алексеева, Ю. С. Варданын, Б. А. Тверской. Геомагнетизм и аэрономия, 9, 437 (1969).
5. Б. А. Тверской. Динамика радиационных поясов Земли. М., Наука, 1968.

ԻՈՆՈՍՖԵՐԱՅԻՆ ՔԱՄԻՆԵՐՈՎ ԳՐԳՌՎԱԾ ՄԱԳՆԵՒՍԱԿԱՆ ԴԱՇՏԵՐԸ ԵՐԿՐԻ ՆԵՐՔԻՆ ՇԵՐՏԵՐՈՒՄ

ՅՈՒ. Ս. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ

Աշխատանքում բերված են երկրի ներքին շերտերում իոնոսֆերային քամիներով գրգռված մագնիսական դաշտերի անալիտիկ արտահայտությունները:

MAGNETIC FIELDS EXCITED BY IONOSPHERIC WINDS IN THE EARTH'S INNER LAYERS

YU. S. VARDANYAN

Analytic expressions are given for magnetic fields excited by ionospheric winds in the Earth's inner layers.

МОЛЕКУЛЯРНЫЙ МЕХАНИЗМ СМЕКТИЗАЦИИ БИНАРНЫХ СМЕСЕЙ НЕМАТИЧЕСКИХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ

А. Ц. САРКИСЯН, Л. С. БЕЖАНОВА, Э. Б. АБРАМЯН

Институт прикладных проблем физики НАН Армении

(Поступила в редакцию 13 ноября 1996г.)

Проведено исследование молекулярного механизма смектизации бинарной смеси сильно- и слабополярных нематических жидких кристаллов. Показано, что в указанном процессе основную роль играет равновесная концентрация молекул донора и акцептора в растворе.

В последние двадцать лет в литературе достаточно активно обсуждается молекулярный механизм индуцирования смектика А, иногда и других типов смектиков (С, В, Е и т.д.) при смешивании двух нематиков. Впервые такие бинарные системы рассмотрены в [1-5].

В настоящее время этой проблеме посвящено большое число теоретических и экспериментальных работ. Из этих исследований следует, что индуцирование смектической фазы при смешивании двух нематиков является результатом сложных межмолекулярных взаимодействий. Причем в одних бинарных системах главным условием смектизации является поляр-неполяр (слабополяр) взаимодействие, в других—донорно-акцепторная связь. В иных системах не работает ни тот, ни другой механизм взаимодействия, а решающим являются стерические факторы. Чаще всего встречаются бинарные системы, индуцирующие смектическую фазу, один из компонентов которых является сильнополярным, а другой—слабополярным соединением с электронно-донорно-акцепторной связью. В сильнополярном нематике большинство его молекул образуют ассоциаты типа димеров с антипараллельным расположением дипольных моментов. Как показывают ЭПР исследования с помощью спинового зонда [6], такие молекулы в растворах образуют, кроме димеров, и ассоциаты более сложной структуры. При добавлении слабополярного компонента к сильнополярному отдельные компоненты оказывают друг на друга деассоциирующее влияние. Анализ ЭПР спектров спинового зонда в бинарных системах сильнополярного (А) и слабополярного (Д) нематиков показывает, что второе вещество, с одной стороны, играет роль детергента для разрушения димеров типа АА и, с другой стороны, само образует димеры типа АД. Другая особенность исследованных бинарных систем заключается в том, что молекулярная подвижность в бинарной системе увеличивается с увеличением концентрации компонента Д [7].

Деассоциация вещества А, согласно [6, 7], приводит к увеличению полярности жидкокристаллической среды. Такое изменение полярности

раствора приводит к изменению электронного распределения в молекулах бинарной системы и к росту их поляризуемости, что облегчает процесс образования комплекса с переносом заряда (КПЗ).

Детально исследуя оптические спектры (УФ и ИК) и сопоставляя полученные результаты с ЭПР данными [6, 7], нам удалось установить, что в бинарных системах, где в качестве сильнополярного компонента выступают цианфениловые эфиры алкилоксибензойных кислот, а в качестве слабополярного—алкилоксиазоксибензола, образуются КПЗ. В этих комплексах акцептором А являются циановые соединения, а донором Д—азоксибензола. В зависимости от концентрации донора С в растворе $A+D$ могут образоваться комплексы типа ДА и D_2A [8].

Таким образом, в растворе бинарной системы сильно- и слабополярного нематиков возможно существование следующих типов частиц: 1) мономеры и несколько процентов ассоциат сильнополярного соединения, 2) молекулы слабополярного компонента, 3) КПЗ типа ДА, 4) КПЗ типа D_2A . При данных постоянных температуре T и давлении P концентрации этих пяти типов частиц в определенном фазовом состоянии находятся в равновесии. Изменение температуры или концентрации исходных компонентов бинарной системы нарушает это равновесие, приводя таким образом к полиморфизму.

В общем виде для описания термодинамического поведения бинарной системы в области фазовых переходов (ФП) и учета специфики строения мезогенных молекул, состава раствора, помимо необходимости введения нескольких параметров ориентационного порядка, связанных с отдельными фрагментами конформационно-неустойчивых молекул, для адекватного описания наблюдаемых молекулярных превращений при ФП нематик-смектик ($N-Sm$) наряду с макроскопическим параметром порядка S , фактически описывающим ориентационное упорядочение жестких молекулярных остовов и особенностей упорядочения гибких цепей, в термодинамическом потенциале бинарной системы необходимо учесть также эффект деассоциации и образования КПЗ.

При таком подходе термодинамический потенциал, характеризующий ФП $N-Sm$, будет сложной функцией стерических параметров молекул бинарной системы, числа и типа частиц, образующихся в этой системе. И поэтому, для понимания роли различных типов межмолекулярных взаимодействий в процессах полиморфизма в бинарных системах нематиков, необходимо провести минимизацию термодинамического потенциала не только по структурным степеням свободы—по параметрам порядка нематической и смектической фаз, но и по молекулярному составу жидкокристаллической среды.

Для дальнейшего анализа бинарную систему рассмотрим как раствор, где акцептор является растворителем, а остальные вещества (донор Д, простые и сложные комплексы ДА и D_2A)—как компоненты растворенных веществ (рассматриваются случаи, когда исходная

концентрация донора ($C_{до}$) в бинарной системе меньше 40 мольных %). Тогда для плотности термодинамического потенциала такого раствора, согласно [9], имеем:

$$\Phi = N\mu_a + \sum_i n_i T \ln \frac{n_i}{N} + \sum_i n_i \psi_i, \quad (1)$$

где N —число молекул растворителя в растворе, n_i —число молекул i -ого компонента растворенных веществ, μ_a —химический потенциал акцептора в растворе, ψ_i —некоторая функция от температуры и давления, T —температура в энергетических единицах. Так как (см. [9])

$$\mu_a = \mu_0 - T \sum_i C_i,$$

где μ_0 —химический потенциал чистого растворителя, C_i —концентрация частиц i -ого компонента раствора, и учитывая, что, согласно [10], из-за взаимодействия нематического параметра порядка S и смектического параметра порядка η к потенциалу Φ следует добавить член $-\frac{1}{2} C^2 \chi \eta^4$ (C —положительная постоянная, χ —функция отклика, которая велика вблизи точки перехода нематик—изотропная жидкость (I), но которая мала при $T < T_{NI}$) то (1) можно представить в виде

$$\Phi = N\mu_0 + \sum_i n_i T \left(\ln \frac{n_i}{N} - 1 \right) + \sum_i n_i (\psi_i - T) - \frac{1}{2} C^2 \chi \eta^4. \quad (2)$$

Далее, если процесс образования комплексов ДА и Д₂А рассмотреть как химическую реакцию с константами равновесия K_1 и K_2 соответственно, то, используя уравнения материального баланса [11] и выражение

$$\rho(z) = \rho_0 [1 + 2^{-1/2} |\eta| \cos q_s z],$$

где $q_s = 2\pi/d$, d —расстояние между слоями смектика, для волны плотности смектической фазы выражение (2) можно записать в виде

$$\Phi = -\frac{1}{2} \chi C^2 \eta^4 + p \eta^3 + q \eta^2 + m \eta + \xi, \quad (3)$$

где

$$p = T[K_1 K_2 N n_1^2 \delta^3 \ln K_1 K_2 n_1^2 + 2K_1 K_2 N n_1^2 \delta^3 r] + K_1 K_2 N n_1^2 \delta^3 (\psi_3 - T), \quad (4)$$

$$\delta = 2^{-1/2} \cos q_s z; \quad r = \frac{\delta}{1 + \delta s},$$

$$q = T[K_1 N n_1 \delta^3 \ln K_1 n_1 + K_1 N n_1 \delta^3 r + 3K_1 K_2 N n_1^2 \delta^3 \ln K_1 K_2 n_1^2 + 6K_1 K_2 N n_1^2 \delta^3 r] + K_1 N n_1 \delta^3 (\psi_2 - T) + 3K_1 K_2 N n_1^2 \delta^3 (\psi_3 - T), \quad (5)$$

$$m = N \delta \mu_0 + T \left[n_1 \delta \ln \frac{n_1}{N} + 2K_1 N n_1 \delta \ln K_1 n_1 + 2K_1 N n_1 \delta r + \right.$$

$$+3K_1K_2Nn_1^2\delta\ln K_1K_2n_1^2+6K_1K_2Nn_1^2\delta r|+\delta n_1(\psi_1-T)+ \\ +2K_1Nn_1\delta(\psi_2-T)+3K_1K_2Nn_1^2\delta(\psi_2-T), \quad (6)$$

$$\dot{\epsilon} = N\mu_0 + T \left[n_1 \ln \frac{n_1}{N} + K_1 N n_1 \ln K_1 n_1 + K_1 N n_1 r + K_1 K_2 N n_1^2 \ln K_1 K_2 n_1^2 + \right. \\ \left. + 2K_1K_2Nn_1^2r \right] + n_1(\psi_1-T) + K_1Nn_1(\psi_2-T) + K_1K_2n_1^2(\psi_2-T). \quad (7)$$

Исключая кубический член в (3), помощью замены $x = \eta - \frac{p}{2\gamma C^2}$ для термодинамического потенциала окончательно получим

$$\Phi(x) = \frac{1}{4}x^4 + \frac{1}{2}ax^2 + bx + c. \quad (8)$$

С помощью выбора начала отсчета энергии можно положить $C=0$, тогда

$$\Phi(x) = \frac{1}{4}x^4 + \frac{1}{2}ax^2 + bx, \quad (9)$$

где

$$a = 2\left(q - \frac{3}{2}p^2\right), \quad (10)$$

$$b = 2p^3 - 2pq + m. \quad (11)$$

Как следует из выражений (4—11), величины a , b , следовательно, и управляемый параметр x , являются функциями двух управляющих параметров — начальной концентрации донора $C_{до}$ и температуры T бинарной системы. Тогда термодинамический потенциал (9), согласно [12], соответствует катастрофе сборки Уитни (рис. 1). Критические точки этого потенциала определяются из условия

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x} = 0, \quad \text{т.е.} \quad x^3 + ax + b = 0. \quad (12)$$

Как видно из рис. 1, в зависимости от пути изменения параметров a и b в бифуркационной области состояние системы может меняться плавно или скачкообразно.

С другой стороны, как следует из выражений (3)—(7), равновесное состояние смектической фазы в основном определяется равновесными значениями концентраций донора и акцептора. А эти концентрации при данных $C_{до}$ и T в конечном итоге определяются константой равновесия K_1 , т.е. управляя величиной этой константы, можно регулировать процесс полиморфизма в бинарных системах сильно- и слабополярных нематиков.

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

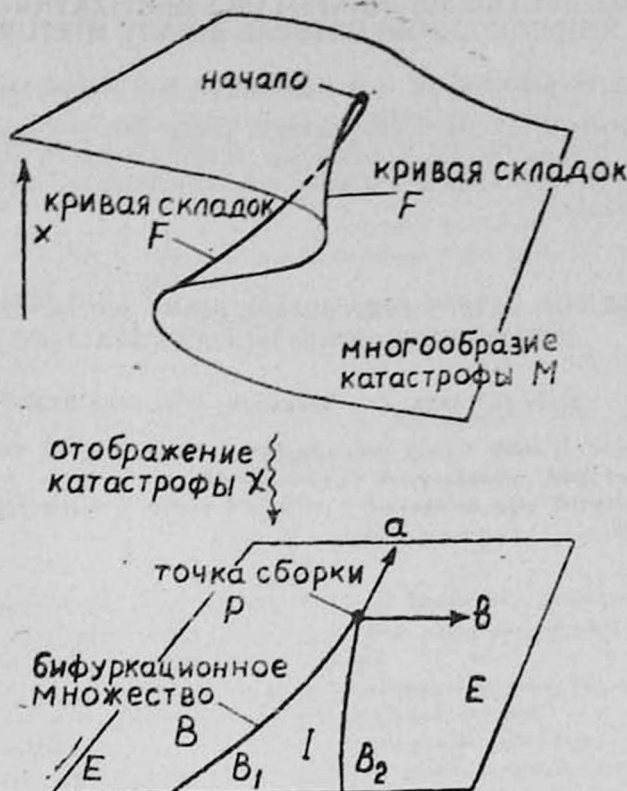


Рис. 1. Поверхность равновесия бинарной системы в пространстве abx и ее отражение на плоскость ab .

ЛИТЕРАТУРА

1. Б. К. Вайнштейн, И. Г. Чистяков, Г. Г. Майдаченко, Л. А. Гусакова, В. Д. Белиловский, В. М. Чайковский, Л. К. Вистинь, С. П. Чумакова. Докл. АН СССР, 220, 1349 (1975).
2. G. W. Gray, D. G. McDonell. Mol. Cryst. Liq. Cryst., 37, 189 (1976).
3. M. Bock, G. Heppke, E. J. Richter, F. Schneider. Mol. Cryst. Liq. Cryst., 45, 221 (1978).
4. И. Г. Чистяков, И. И. Горина, М. Ю. Рубцова. Кристаллография, 22, 334 (1977).
5. G. Heppke, E. J. Richter. Naturforsch., 33a, 185 (1978).
6. А. Ц. Саркисян, Л. С. Бежанова. Ж. физ. химии, 63, 2504 (1989).
7. А. Ц. Саркисян, Л. С. Бежанова, С. М. Яйлоян, Г. И. Карпушкина. Химическая физика, 9, 1564 (1990).
8. L. S. Bezhanova. Summer European Liquid Crystals Conference Abstracts, v. 2, p. 112, 1991, Lithuania.
9. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Статистическая физика. М., Наука, 1976.
10. П. де Жен. Физика жидких кристаллов. М., Мир, 1977.
11. Е. Н. Гурьянова, И. П. Гольдштейн, И. П. Ромм. Донорно-акцепторная связь. М., Химия, 1973.
12. Т. Постон и И. Стюарт. Теория катастроф и ее приложения. М., Мир, 1980.

MOLECULAR MECHANISM OF SMECTIZATION OF NEMATIC LIQUID CRYSTAL BINARY MIXTURES

A. TS. SARKISSYAN, L. S. BEZHANOVA, E. B. ABRAHAMYAN

The molecular mechanism of smectization of strong- and weak-polar nematic liquid crystal binary mixtures has been investigated. It is shown that the equilibrium concentration of the molecules of donor and acceptor in the solution has the main meaning in the indicated process.

ՆԵՄԱՏԻԿ ՀԵՂՈՒԿ ԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐԻ ԲԻՆԱՐ ԽԱՌՆՈՒՐԴՆԵՐԻ ՍՄԵԿՏԻԿԱՑՄԱՆ ՄՈԼԵԿՈՒԼԱՅԻՆ ՄԵԽԱՆԻԶՄԸ

Ա. Յ. ՍԱՐԳՍՅԱՆ, Լ. Ս. ԲԵԺԱՆՈՎԱ, Է. Բ. ԱԲՐԱՀԱՄՅԱՆ

Հետազոտված է ուժեղ և թույլ բևեռայնություն ունեցող նեմատիկ հեղուկ բյուրեղների բինար խառնուրդների սմեկտիկացման մոլեկուլային մեխանիզմը: Ցույց է տրված, որ այդ պրոցեսում հիմնական դերը պատկանում է լուծույթում դոնորի և ակցեպտորի հավասարակշիռ խտություններին:

CONTENTS

A. A. Kirakosian, M. Gh. Ghoumashian, A. L. Asatrian. Magnetic susceptibility of size-quantized wire. «Diamagnetic-paramagnetic» size-transition in wires . . .	55
A. P. Djotyan, B. G. Poghosyan. Interband light absorption in semiconductors with narrow forbidden band in a quantizing magnetic field . . .	64
A. S. Gasparian, E. M. Kazarian. Impurity states in quasi-zero dimensional semiconducting structures with heavily flattened (stretched) ellipsoidal form . . .	70
M. L. Ter-Mikaelyan. Rayleigh and combinational scatterings of light pulse in a homogeneous gaseous medium . . .	78
R. V. Chifflikian. A new method for calculation of excitation efficiency of vibrational levels of molecules in gas mixtures . . .	86
Yu. S. Vardanyan. Magnetic fields excited by ionospheric winds in the Earth's inner layers . . .	90
A. Ts. Sarkissyan, L. S. Bezhanova, E. B. Abrahamyan. Molecular mechanism of smectization of nematic liquid crystal binary mixtures . . .	95

ԲՈՎԱՆԴԱԿՈՒԹՅՈՒՆ

Ա. Ա. Կիրակոսյան, Մ. Գ. Գումաշյան, Ա. Լ. Ասատրյան. Չափայնորեն քվանտացված կիսահաղորդչային լարի մագնիսական ընկալունակությունը: «Դիամագնիս-պարամագնիս» չափային անցումը լարերում . . .	55
Ա. Պ. Զոթյան, Բ. Գ. Պոգոսյան. Լույսի միջգոտիական կլանումը նեղ արգելված գոտիով կիսահաղորդչներում քվանտացնող մագնիսական դաշտում . . .	64
Ա. Ս. Գասպարյան, Է. Մ. Կազարյան. Խառնուրդային վիճակները խիստ սեղմված (ձգված) էլիպսոիդային ձևի քվադրոլային կիսահաղորդչային կառուցվածքներում . . .	70
Մ. Լ. Տեր-Միքայելյան. ռադիոլին ճառագայթի Ռեյլեյի և կոմբինացիոն ցրումը համասեռ դադային միջավայրում . . .	78
Ռ. Վ. Չիֆլիկյան. Դադային խառնուրդներում մոլեկուլների տատանողական մակարդակների զրգուման արդյունավետության հաշվարկի նոր մեթոդ . . .	86
Յու. Ս. Վարդանյան. Իոնոսֆերային քամիներով զրգումված մագնիսական դաշտերը երկրի ներքին շերտերում . . .	90
Ա. Յ. Տարգսյան, Լ. Ս. Բեժանովա, Է. Բ. Աբրահամյան. Նմատիկ հեղուկ բյուրեղների բինար խառնուրդների սմեկտիկացման մոլեկուլային մեխանիզմը . . .	95

Технический редактор В. Д. СТЕПАНЯН

Сдано в набор 30.09.1997 г. Подписано к печати 27.11.1997 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 29.
 Издат. 7952. Цена договорная.

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

5009p1

АЖ 415
1998, 33 n/2

Индекс 77709

СОДЕРЖАНИЕ

А. А. Киракосян, М. К. Кумашян, А. Л. Асатрян. Магнитная восприимчивость размерно квантованной полупроводниковой проволоки. Размерный переход «диамагнетик-парамагнетик» в проволоках	55
А. П. Джотян, Б. Г. Погосян. Межзонное поглощение света в полупроводнике с узкой запрещенной зоной в квантующем магнитном поле	64
А. С. Гаспарян, Э. М. Казарян. Примесные состояния в квазиульмерных полу- проводниковых структурах с сильно сплюснутой (вытянутой) эллипсои- дальной формой	70
М. Л. Тер-Микаелян. Релеевское и комбинационное рассеяние светового им- пульса в однородной газовой среде	78
Р. В. Чифликян. Новый метод расчета эффективности возбуждения колеба- тельных уровней молекул в газовых смесях	86
Ю. С. Вардanian. Магнитные поля, возбуждаемые ионосферными ветрами во внутренних слоях Земли	90
А. Ц. Саркисян, Л. С. Бежанова, Э. Б. Абрамян. Молекулярный механизм смек- тизации бинарных смесей нематических жидких кристаллов	95