

ISSN 0002-3035

**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 ԿՈՆԵՐԻԱ

**Վլ. Մ. Հարությունյան**, գլխավոր խմբագիր  
**Է. Գ. Շառոյան**, 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. Arutiunian**, 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. Mkrтчyan**  
**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.

УДК 535.42

## РАСПРОСТРАНЕНИЕ ФЕМТОСЕКУНДНОГО ЛАЗЕРНОГО ИМПУЛЬСА В ЛИНЕЙНОЙ ДИСПЕРСНОЙ СРЕДЕ

А. А. АКОПЯН, Д. Л. ОГАНЕСЯН

(Поступила в редакцию 5 июня 1998 г.)

В работе получено решение линейного волнового уравнения, описывающее распространение фемтосекундного лазерного импульса длительностью в несколько оптических периодов колебаний в среде с учетом линейной дисперсии второго порядка и отражения на входе в среду.

Известно, что при прохождении пико- и фемтосекундных лазерных импульсов через оптически линейную дисперсную среду происходит искажение формы импульса. В работах [1-3] данная задача решалась в приближении медленно меняющихся амплитуд (ММА) сведением к линейному уравнению Шредингера. В соответствии с этими решениями искажение формы заключается в появлении быстрых осцилляций на заднем фронте огибающей импульса. Для описания поведения импульсов длительностью в несколько оптических колебаний поля метод ММА, конечно, неприменим. В этом случае можно использовать метод укорочения волнового уравнения в приближении однонаправленных волн [4-7].

В данной работе методом укорочения получено решение исходного волнового уравнения, описывающее линейное распространение фемтосекундного лазерного импульса в среде с учетом дисперсии второго порядка и отражения на входе в среду.

Волновое уравнение для напряженности поля  $E$  скалярной плоской волны в линейном оптически однородном изотропном диэлектрике имеет следующий вид:

$$(\partial^2/\partial z^2 - (1/c^2) \cdot \partial^2/\partial t^2)E = (4\pi/c^2) \cdot \partial^2 P/\partial t^2. \quad (1)$$

В выражении для линейной поляризации среды  $P$

$$P(t) = \int_0^{\infty} \alpha(\tau) E(t-\tau) d\tau, \quad (2)$$

где  $\alpha(t)$  – линейная восприимчивость среды, напряженность электрического поля под знаком интеграла можно разложить по малому параметру  $\mu = \tau_{от}/T_0$ , где  $\tau_{от}$  – время отклика среды,  $T_0$  – средний период колебаний (для плавленого кварца  $\tau_{от} \approx 0,2$  фс, а это означает, что в инфра-

красной области спектра параметр  $\mu$  мал). При этом линейная поляризация примет следующий вид:

$$P(t) = P_0(t) + P_1(t), \quad (3)$$

где

$$P_0(t) = \alpha(\omega = 0) \cdot E(t), \quad (4)$$

$$P_1(t) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{i^k}{k!} \alpha^{(k)}(\omega = 0) \cdot \frac{\partial^k E}{\partial t^k}. \quad (5)$$

Здесь  $\alpha^{(k)}(\omega = 0)$  – низкочастотные пределы производных  $k$ -го порядка фурье-компонент линейной восприимчивости.

Для волны, распространяющейся в направлении увеличения  $z$ , уравнение (1) сводится к следующему уравнению:

$$(\partial/\partial z + (n_0/c) \cdot \partial/\partial t)E = -(2\pi/cn_0) \cdot \partial P_1/\partial t, \quad (6)$$

где  $n_0$  – линейная часть показателя преломления. Подставляя (5) в (6), получим

$$\frac{\partial E}{\partial z} + \frac{n_0}{c} \cdot \frac{\partial E}{\partial t} = -\frac{2\pi}{cn_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{i^k}{k!} \alpha^{(k)}(\omega = 0) \cdot \frac{\partial^{k+1} E}{\partial t^{k+1}}. \quad (7)$$

В уравнении (7) с учетом малости параметра  $\mu$  оставим лишь первый ненулевой член под знаком суммы:

$$E'_z + (n_0/c)E'_t - \pi\alpha^{(2)}(\omega = 0) \cdot E''_t / (cn_0) = 0. \quad (8)$$

Переходя в уравнении (8) к безразмерным величинам по формулам  $E = E_0 \cdot \Phi$ ;  $\xi = zn_0/(c\tau_0)$ ;  $\eta = zn_0/(c\tau_0) - t/\tau_0$ ;  $b = \pi\alpha^{(2)}(\omega = 0)/(n_0^2\tau_0^2)$ , где  $2\tau_0$  – длительность импульса,  $E_0$  – максимальное значение действительной амплитуды вектора напряженности электрического поля,  $\Phi$  – нормированное действительное значение вектора напряженности электрического поля в среде, получим

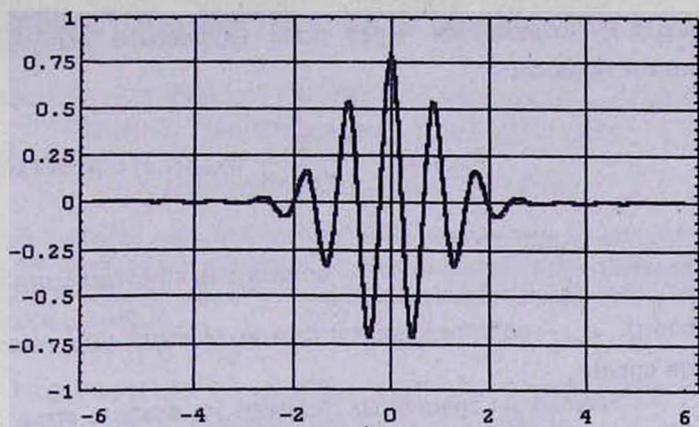
$$\Phi'_\xi + b\Phi''_\eta = 0. \quad (9)$$

Это – линеаризованное уравнение Кортевега – де-Вриза. В приближении ММА оно сводится к линейному уравнению Шредингера [8].

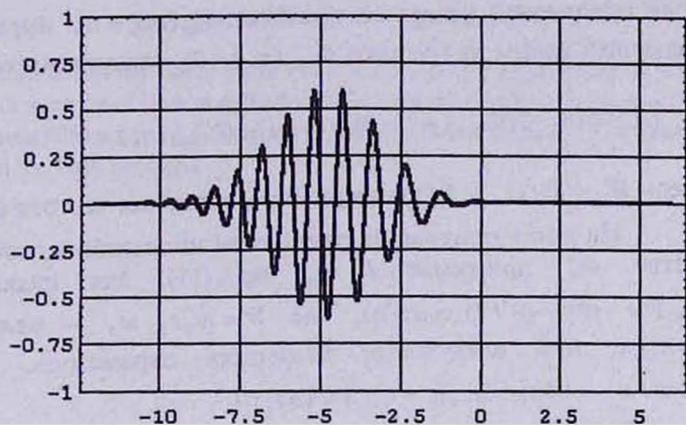
Решение (9) записывается как

$$\Phi(\eta, \xi) = \frac{1}{\sqrt[3]{3b\xi}} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_0(\eta_1, \xi = 0) \cdot \text{Ai}\left(\frac{\eta - \eta_1}{\sqrt[3]{3b\xi}}\right) d\eta_1, \quad (10)$$

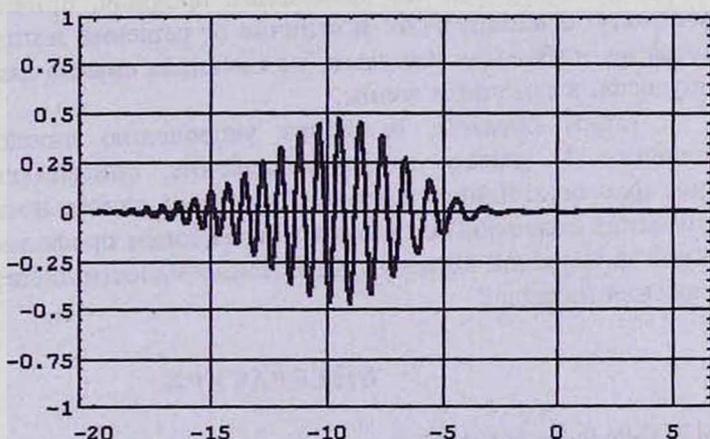
где  $\Phi(\eta, \xi = 0)$  – поле на входе в среду, а  $\text{Ai}(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \cos(ux + \frac{u^3}{3}) du$  – функция Эйри.



а)



б)



в)

Рис.1. Изменение поля импульса с расстоянием при следующих значениях параметров:  $2\tau_0 = 8$  фс;  $\lambda_0 = 1,06$  мкм;  $n_0 = 1,5$ ,  $b = 1,57 \cdot 10^{-5}$ ; а)  $z = 0$  мм; б)  $z = 1,6$  мм; в)  $z = 3,2$  мм.

Согласно формулам Френеля, поле прошедшего импульса  $\Phi_{np}(t, z)$  выражается через поле падающего импульса  $\Phi_{пад}(t, z)$  следующим образом:

$$\Phi_{np}(t, z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2}{n(\omega) + 1} \Phi_{пад}(\omega, z) \exp(-i\omega t) d\omega, \quad (11)$$

где  $n(\omega) = \sqrt{1 + \frac{1}{1 - (\omega/\omega_n)^2}}$  — показатель преломления среды (плавненный кварц),  $\omega_n$  — собственная частота колебаний упруго-связанных электронов среды.

Исходя из граничных условий на входе в среду и с учетом разложения выражения  $2/(n(\omega) + 1)$  в (11) в ряд по малому параметру  $(\omega/\omega_n)$ , поле прошедшей волны на границе,  $\Phi_{np}(\eta, \xi = 0)$ , выражается через поле падающей волны на границе,  $\Phi_{пад}(\eta, \xi = 0)$ , следующим образом:

$$\Phi_{np}(\eta, \xi = 0) = 2 \cdot \Phi_{пад}(\eta, \xi = 0) / (n_0 + 1) + \Phi''_{пад}(\eta, \xi = 0) / (n_0 \cdot (n_0 + 1)^2 \cdot W_p^2). \quad (12)$$

Здесь  $W_p = \omega_p \cdot \tau_0$  — безразмерная резонансная частота среды.

На рис.1 приведены результаты численного расчета (10), где в качестве  $\Phi_0$  принимается  $\Phi_{np}$  из (11), для падающего импульса  $\Phi_{пад}(\eta) = \exp(-\eta^2/2) \cdot \cos(W\eta)$ , где  $W = \omega_0 \tau_0$ ,  $\omega_0$  — центральная частота спектра, при следующих значениях параметров:  $2\tau_0 = 8$  фс;  $\lambda_0 = 2\pi c / \omega_0 = 1,06$  мкм;  $n_0 = 1,5$ ;  $b = 1,57 \cdot 10^{-5}$ .

Согласно этим расчетам, при распространении импульса в среде происходит уширение его временного профиля, причем это уширение происходит асимметрично. В отличие от решений методом ММА, искажается не огибающая импульса, не имеющая смысла для столь коротких импульсов, а само поле волны.

Таким образом, благодаря укорочению линейного волнового уравнения (1) удалось получить решение, описывающее распространение фемтосекундного лазерного импульса длительностью в несколько оптических колебаний с гауссовым временным профилем на входе в линейной дисперсной среде в приближении малости дисперсии и с учетом отражения на входе.

## ЛИТЕРАТУРА

1. J.E.Rothenberg, D.Grischkowsky. JOSA B, 2, 626 (1985).
2. D.Anderson, M.Lisak. Opt. Lett., 11, 569 (1986).
3. D.Anderson, M.Lisak. Phys. Rev. A, 35, 184 (1987).
4. Э.М.Беленов, А.В.Назаркин. Письма в ЖЭТФ, 51, 252 (1990).
5. А.И.Маймистов. Оптика и спектроскопия, 76, 636 (1994).
6. С.А.Козлов, С.В.Сазонов. ЖЭТФ, 111, 404 (1997).

ՖԵՄՏՈՎԱՅՐԿՅԱՆԱՅԻՆ ԼԱԶԵՐԱՅԻՆ ԻՄՊՈՒԼՍԻ ՏԱՐԱԾՈՒՄԸ  
ԳԾԱՅԻՆ ԴԻՍՊԵՐՍԱՅԻՆ ՄԻՋԱՎԱՅՐՈՒՄ

Ա. Հ. ՀԱԿՈՔՅԱՆ, Դ. Լ. ՀՈՎՀԱՆՆԻՍՅԱՆ

Ստացված է գծային ալիքային հավասարման լուծումը, որը նկարագրում է մի քանի օպտիկական տատանումների տևողությամբ ֆեմտովայրկյանային լազերային իմպուլսի տարածումը միջավայրում հաշվի առնելով երկրորդ կարգի գծային դիսպերսիան և անդրադարձումը միջավայր մտնելիս:

PROPAGATION OF A FEMTOSECOND LASER PULSE  
IN A LINEAR DISPERSIVE MEDIUM

A. A. AKOPYAN, D. L. OGANESYAN

The solution of the linear wave equation describing propagation of a femtosecond laser pulse with duration of several optical periods of oscillation in a medium with taking into account the linear dispersion of the second order and with consideration of the reflection on the input plane has been obtained.

УДК 535.343.4

## ЛАЗЕРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ РАЗРЕЖЕННЫХ ПАРОВ ЦЕЗИЯ В СЛАБОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

А. В. ПАПОЯН, Г. С. САРКИСЯН, Д. Г. САРКИСЯН

Институт физических исследований НАН Армении

(Поступила в редакцию 8 апреля 1998 г.)

Экспериментально исследовано поглощение непрерывного, линейно поляризованного лазерного излучения в разреженных парах цезия (плотность атомов  $\sim 10^{11}$  см<sup>-3</sup>) на сверхтонкой структуре резонансной линии D<sub>2</sub>. Выявлена существенная зависимость коэффициента поглощения от величины индукции внешнего магнитного поля ( $\sim 10^{-2}$  Гс и выше) при интенсивности лазерного излучения свыше 1 мВт/см<sup>2</sup>. Обсуждается возможная связь наблюдаемого эффекта с явлением когерентного пленения населенностей.

### Введение

Появление перестраиваемых лазеров с малой спектральной шириной линии излучения (<50 МГц) способствовало активному развитию лазерной спектроскопии разреженных атомарных газов (паров) и атомных пучков, позволяя исследовать процессы, связывающие уровни сверхтонкой структуры атомов. В числе других новых импульс получили магнито-оптические и поляризационные исследования, в которых существенную роль играет структура магнитных подуровней задействованных переходов.

Мощным инструментом исследований в этой области является лазерная спектроскопия газовой среды, помещенной между скрещенными поляризаторами (т.н. «рассеяние вперед»). Указанный метод обеспечивает высокую чувствительность к отклонениям от линейного отклика среды. Многочисленные работы в этом направлении выявили наличие таких взаимосвязанных процессов, как наведение мультипольных моментов высших порядков и ориентации возбужденных уровней, стимулированное пересечение уровней, магнитный циркулярный дихроизм и двулучепреломление (эффект Фарадея) и т.д. [1-5].

Другим направлением магнито-оптической спектроскопии является исследование резонансной флюоресценции и поглощения излучения в газовой среде или атомных пучках. В последние годы наблюдается заметный интерес к когерентным процессам в многоуровневых системах, где одновременное приложение двух полей излучения может вызвать образование когерентных суперпозиционных состояний, приводящих к нулевому поглощению на оптических переходах («темные

резонансы»). Это явление, прямо или косвенно связанное с эффектом Ханле, получило название «когерентное пленение населенностей» (см. обзорную работу [6] и ссылки в ней). В газовой среде (пары щелочных металлов) темные резонансы наблюдались лишь при двухчастотном лазерном возбуждении [7-10]. Когерентное пленение населенностей при одночастотном возбуждении получено в атомном пучке Na [11].

В настоящей работе нами исследовалось влияние слабого магнитного поля на резонансное поглощение излучения разреженными парами Cs на переходе  $D_2$  с целью выявления возможности реализации когерентного пленения населенностей при одночастотном возбуждении паров линейно поляризованным лазерным излучением.

### Экспериментальная установка

Схема экспериментальной установки представлена на рис.1. Непрерывное излучение лазерного диода Hitachi HLP 1400 направлялось параллельным пучком (без фокусировки) в стеклянную кювету длиной 1,65 см с боковым отростком, содержащим цезий. В типичных условиях эксперимента кювета находилась при температуре  $28^\circ\text{C}$ , что соответствует, согласно [12], давлению паров  $p = 2,82 \cdot 10^{-6}$  Торр или плотности атомов  $N = 8,93 \cdot 10^{10}$  см<sup>3</sup>. Прошедшее сквозь пары излучение регистрировалось фотодиодом ФД24К. Второй аналогичный фотодиод, установленный перпендикулярно направлению лазерного излучения, детектировал сигнал резонансной флюоресценции паров. Сигналы фотодиодов усиливались операционными усилителями и либо наблюдались одновременно на двухлучевом осциллографе С1-74, либо записывались графопостроителем Н306.

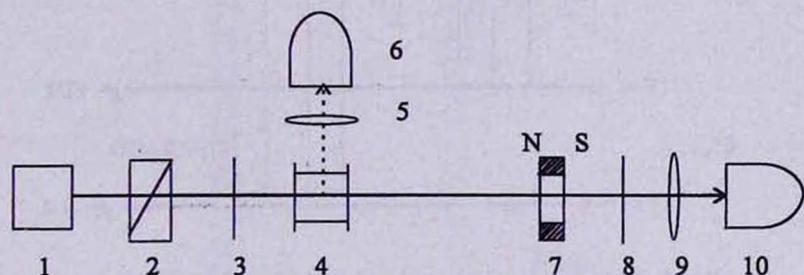


Рис.1. Схема оптической части экспериментальной установки. 1 – лазерный диод; 2 – призма Глана-Томсона; 3,8 – светофильтры-аттенюаторы; 4 – кювета с парами цезия; 5,9 – линзы; 6,10 – фотодиоды с операционными усилителями; 7 – кольцевой постоянный магнит.

Для получения спектров поглощения (пропускания) и флюоресценции частота лазерного излучения линейно сканировалась в спектральной области  $21,7$  ГГц ( $0,72$  см<sup>-1</sup>) вокруг  $D_2$ -линии атомов Cs ( $852,3$  нм) посредством модуляции тока инжекции. При наблюдении спектра на осциллографе применялась пилообразная модуляция с частотой  $75$  Гц; при записи спектра на графопостроителе осуществлялось еди-

ническое сканирование длительностью 10 с. В условиях нашего эксперимента мощность лазерного излучения составляла около 4 мВт при диаметре пучка 3,5 мм, так что максимальная интенсивность излучения на входе в кювету (без ослабления фильтрами) достигала 40 мВт/см<sup>2</sup>. Спектральная ширина лазерного излучения составляла 20 МГц ( $6,7 \cdot 10^{-4}$  см<sup>-1</sup>). Для увеличения степени линейной поляризации лазерного излучения использовалась призма Глана-Томсона.

Продольное магнитное поле в кювете обеспечивалось кольцевым постоянным магнитом, ось которого совмещалась с направлением излучения. Имелась возможность варьировать индукцию магнитного поля в парах от  $9 \cdot 10^{-3}$  до 30 Гс, перемещая магнит по направляющей на расстояние от 100 до 6 см от кюветы. Зависимость индукции магнитного поля от расстояния в диапазоне 1 – 30 Гс была проградуирована с использованием измерителя Ш1-8. Отметим, что фоновое лабораторное магнитное поле в настоящем эксперименте не компенсировалось.

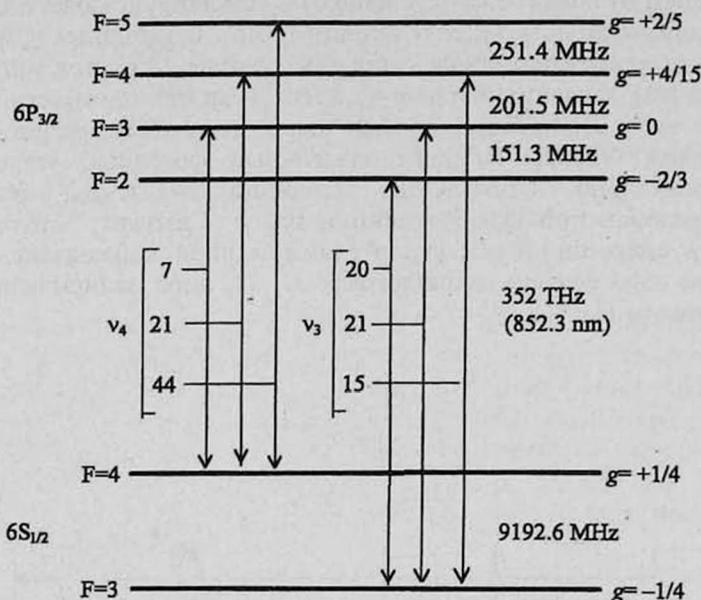


Рис.2. Схема сверхтонкой структуры  $D_2$ -линии атома цезия. Справа указаны факторы Ланде ( $g$ ) для сверхтонких подуровней. Числа рядом с каждым переходом указывают его относительную вероятность.

На рис.2 приведена схема уровней атома цезия, задействованных в эксперименте. Так как сверхтонкое расщепление уровня  $6P_{3/2}$  меньше доплеровского уширения ( $\sim 380$  МГц), регистрировались только две спектрально разрешенные линии:  $6S_{1/2}(F=3) \rightarrow 6P_{3/2}(F=2,3,4)$  ( $\nu_3$ ) и  $6S_{1/2}(F=4) \rightarrow 6P_{3/2}(F=3,4,5)$  ( $\nu_4$ ). Частотное расстояние между этими линиями составляло 9,2 ГГц, что обусловлено сверхтонким расщеплением основного уровня  $6S_{1/2}$  ( $F = 3,4$ ).

## Результаты и обсуждение

Когда лазерное излучение на входе в кювету с цезием ослабляется фильтром 3 (рис.1) до  $I_0 \leq 1$  мВт/см<sup>2</sup>, при  $N = 8,93 \cdot 10^{10}$  см<sup>-3</sup> наблюдается 29,9 % пропускания на переходе  $\nu_3$  и 20,0 % – на переходе  $\nu_4$ . Это соответствует коэффициенту поглощения  $\alpha = 0,732$  см<sup>-1</sup> и  $0,975$  см<sup>-1</sup> соответственно (последний определяется как

$$\alpha = -\frac{1}{l} \ln \frac{I}{I_0},$$

где  $I$  – интенсивность прошедшего излучения,  $l$  – длина взаимодействия). Заметим, что отношение этих коэффициентов с точностью 3,5 % совпадает с отношением вероятностей переходов  $\nu_3$  и  $\nu_4$  (7:9). При указанных значениях  $I_0$  приложение внешнего магнитного поля не влияет на величину поглощения. При увеличении интенсивности лазерного излучения до 40 мВт/см<sup>2</sup> в отсутствие внешнего магнитного поля пропускание возрастает до 84,9 % на переходе  $\nu_3$  и 52,4 % на  $\nu_4$  ( $\alpha = 0,099$  см<sup>-1</sup> и  $0,392$  см<sup>-1</sup>).

Спектры пропускания паров в случаях слабого и сильного лазерного поля приведены на рис.3. Следует отметить, что из-за зависимости мощности излучения лазерного диода от длины волны величина  $I_0$  в положении  $\nu_3$  была в 1,122 раза меньше, чем в положении  $\nu_4$ . Эта особенность, ясно заметная на рис.3, учтена в расчетах.

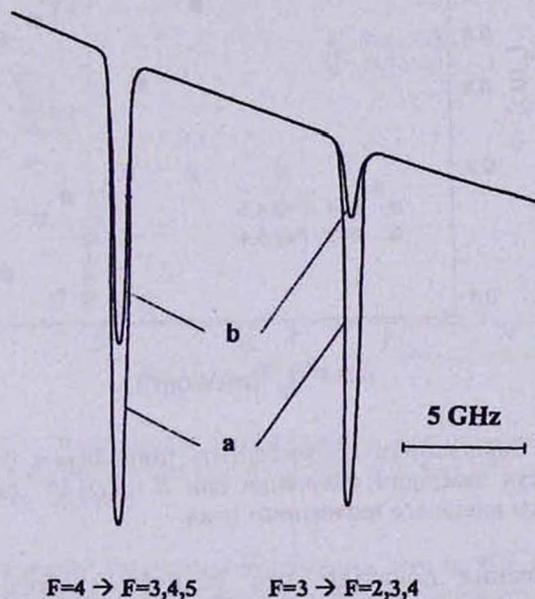


Рис.3. Спектры пропускания при  $I_0 = 0,04$  мВт/см<sup>2</sup> (а) и 40 мВт/см<sup>2</sup> (б) в отсутствие внешнего магнитного поля;  $N = 8,93 \cdot 10^{10}$  см<sup>-3</sup>. В случае (а) фильтр-ослабитель находился в положении 3 (см. рис.1); в случае (б) тот же фильтр – в положении 8. Горизонтальная линия указывает уровень нулевого пропускания.

Зависимости коэффициента поглощения  $\alpha$  на переходах  $\nu_3$  и  $\nu_4$  от интенсивности лазерного излучения в нулевом магнитном поле показаны на рис.4. Как видно из этого рисунка, при  $I_0 > 1$  мВт/см<sup>2</sup> наблюдается уменьшение поглощения на обоих переходах. Это уменьшение может быть качественно объяснено насыщением поглощения интенсивного излучения. Насыщающая интенсивность (интенсивность, при которой вероятности вынужденного и спонтанного переходов равны друг другу) определяется выражением

$$I_s = \frac{2\pi\hbar\nu_{3,4}^3\Gamma}{c^2},$$

где  $\Gamma$  – однородное уширение спектральной линии [13]. Для D<sub>2</sub>-линии атомов цезия  $I_s \approx 1,1$  мВт/см<sup>2</sup>, что согласуется с экспериментальными зависимостями на рис.4. Однако наблюдаемый спад поглощения на переходе  $\nu_3$  происходит резче, чем на  $\nu_4$ , что, как показывают количественные оценки, не может быть объяснено только механизмом насыщения.

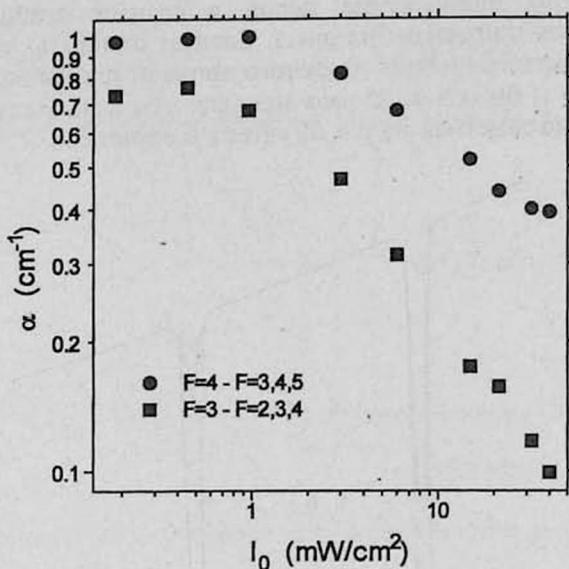


Рис.4. Зависимость коэффициента поглощения от интенсивности лазерного излучения при  $N = 8,93 \cdot 10^{10}$  см<sup>-3</sup> в отсутствие внешнего магнитного поля.

Исследования показали, что наличие слабого внешнего магнитного поля существенно влияет на величину поглощения при  $I_0 > 1$  мВт/см<sup>2</sup>. На рис.5 представлена зависимость коэффициента поглощения от индукции продольного магнитного поля  $B$  при  $I_0 = 40$  мВт/см<sup>2</sup>. Как видно из этого рисунка, величина  $\alpha$  на переходе  $\nu_3$  увеличивается в  $\approx 1,5$  раза при увеличении  $B$  от 0 до 1 Гс. Зависимость величины  $\alpha$  от  $B$  на переходе  $\nu_4$  выражена намного слабее.

Количественные измерения выявили полную корреляцию поглощения и флюоресценции: во всем диапазоне изменения параметров

эксперимента спектры флюоресценции были идентичны спектрам поглощения.

При повышении плотности паров выше  $10^{11} \text{ см}^{-3}$  в условиях настоящего эксперимента реализуется оптически толстый слой (полное поглощение резонансного излучения, по крайней мере, на переходе  $\nu_4$ ), что усложняет интерпретацию полученных результатов. Поэтому зависимость регистрируемых сигналов от плотности паров исследована лишь качественно. Эксперимент показал, что чувствительность спектров поглощения к магнитному полю сохраняется до  $N \sim 10^{13} \text{ см}^{-3}$ , т.е. до тех пор, когда собственное резонансное столкновительное уширение

$$\gamma_{\text{self}} = \frac{e^2 f N}{\sqrt{2} m v_0}$$

(где  $e$  и  $m$  – заряд и масса электрона,  $f$  и  $v_0$  – сила осциллятора и частота перехода  $D_2$ ), становится сравнимым с радиационной шириной  $\gamma \approx 6$  МГц. Напомним, что эксперимент проводился в «чистых» парах – без буферного газа.

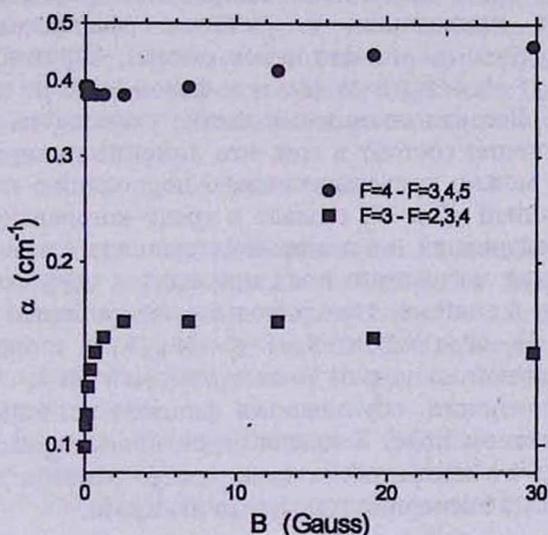


Рис.5. Зависимость коэффициента поглощения от индукции магнитного поля при  $N = 8,93 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$ .  $I_0 = 40 \text{ мВт/см}^2$ .

Интенсивность лазерного излучения могла быть увеличена посредством фокусировки или сужения пучка телескопом. Однако в этом случае наряду с интенсивностью изменялось бы и время взаимодействия атомов с излучением. Пролетное время атомов сквозь пучок в эксперименте было неизменным и составляло  $1,5 \cdot 10^{-5} \text{ с}$ .

Заметим, что при линейном сканировании частоты лазерного излучения фотодиод регистрирует спектр возбуждения, который идентичен спектру пропускания (или флюоресценции) лишь в случае линейного отклика среды. Детальный спектральный анализ выходящего из

кюветы излучения нами не проводился. Однако измерения, проведенные с использованием калиброванных светофильтров, позволили выяснить, что частота выходящего излучения полностью локализована в области  $D_2$ -линии. К возможному перераспределению частоты в пределах  $D_2$ -линии могут привести комбинационное рассеяние или оптическая накачка с переводом населенности с одного сверхтонкого подуровня основного состояния  $6S_{1/2}$  на другой. Однако указанные процессы не могут иметь высокую эффективность при данных параметрах эксперимента.

Тот факт, что небольшие изменения напряженности магнитного поля, приводящие к энергетическому расщеплению уровней порядка 0,01 МГц, вызывают столь существенное изменение амплитуды сигналов, позволяет предположить, что решающую роль здесь играют интерференционные процессы, связывающие магнитные подуровни основного и возбужденного состояний. Зависимости, представленные на рис.4 и 5, можно качественно объяснить, допуская, что в эксперименте реализуется когерентное пленение населенностей при  $I_0 > 1$  мВт/см<sup>2</sup> и нулевом магнитном поле. Действительно, в конфигурации  $D_2$ -линии возможны 6 схем пленения, когерентно связывающих магнитные подуровни и приводящих к «темным резонансам» на переходах  $6S_{1/2}(F=3) \rightarrow 6P_{3/2}(F=2)$  (6- и 4-фотонные схемы);  $6S_{1/2}(F=3) \rightarrow 6P_{3/2}(F=3)$  (6-фотонная);  $6S_{1/2}(F=4) \rightarrow 6P_{3/2}(F=3)$  (8- и 6-фотонные) и  $6S_{1/2}(F=4) \rightarrow 6P_{3/2}(F=4)$  (8-фотонная). Все эти возможные схемы указаны на рис.6. Суть когерентного пленения состоит в том, что линейно поляризованное излучение, которое можно представить как суперпозицию излучений с круговой поляризацией  $\sigma^+$  и  $\sigma^-$ , создает в среде когерентную суперпозицию магнитных подуровней, не взаимодействующую с лазерным излучением [6]. Приложение магнитного поля приводит к нарушению симметрии и когерентности в системе, что приводит к поглощению излучения. Переходы  $6S_{1/2}(F=3) \rightarrow 6P_{3/2}(F=4)$  и  $6S_{1/2}(F=4) \rightarrow 6P_{3/2}(F=5)$ , имеющие вероятности 26 % от суммарной на  $\nu_3$  и 61 % от суммарной на  $\nu_4$  соответственно, не участвуют в пленении, обуславливая фоновое поглощение на  $\nu_3$  и  $\nu_4$  в нулевом магнитном поле. Большая вероятность перехода  $F=4 \rightarrow F=5$  приводит к тому, что пленение на  $\nu_4$  выражено заметно слабее, чем на  $\nu_3$ , что согласуется с экспериментальными данными.

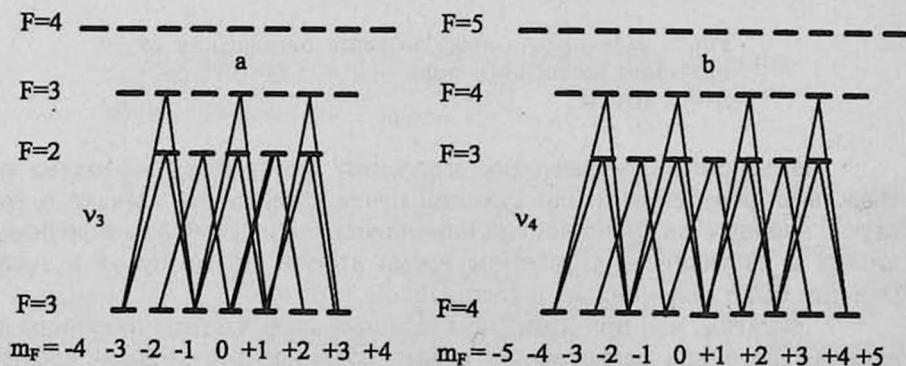


Рис.6. Возможные схемы реализации когерентного пленения населенностей на переходах  $6S_{1/2}(F=3) \rightarrow 6P_{3/2}(F=2,3,4)$  (а) и  $6S_{1/2}(F=4) \rightarrow 6P_{3/2}(F=3,4,5)$  (б).

В пользу механизма когерентного пленения населенностей говорит также то, что при возбуждении среды излучением с круговой поляризацией магнитная зависимость поглощения (флюоресценции) не наблюдалась. Отсутствие магнитной зависимости при высоких плотностях паров (см. выше) также объясняется в рамках этого механизма: атомные столкновения, вносящие вклад в однородное уширение спектральных линий при  $N > 10^{12} \text{ см}^{-3}$ , сбивают когерентную связь, нарушая условия пленения.

Наличие доплеровского уширения спектральных линий в парах приводит к тому, что условия пленения на каждом переходе (см. рис.6) при данной частоте лазерного излучения в пределах доплеровского контура имеют место для определенной группы атомов по скоростям. То, что когерентное пленение проявляется после усреднения по доплеровскому профилю, не является очевидным результатом. Насколько нам известно из литературы, до сих пор не было работ по когерентному пленению населенностей в парах при одночастотном возбуждении.

Результаты, представленные в настоящей работе, надо рассматривать как предварительные. Предполагается проведение более детальных исследований, в частности, с надлежащей компенсацией остаточного лабораторного магнитного поля. Теоретическая интерпретация результатов усложняется большим количеством задействованных уровней и переходов, а также наличием доплеровского уширения. Однако она может быть осуществлена с использованием численных методов расчета.

### Заключение

Впервые экспериментально выявлена зависимость резонансного поглощения линейно поляризованного лазерного излучения в разреженных парах цезия от внешнего магнитного поля. Полученные результаты качественно объясняются механизмом когерентного пленения населенностей магнитных подуровней сверхтонкой структуры  $D_2$ -линии в нулевом магнитном поле.

Авторы благодарят Ю.П.Малакьяна, Р.Г.Унаняна и М.Е.Мовсесяна за полезные обсуждения, а также Laboratoire de Physique des Lasers, Université Paris-Nord (Франция) за техническое содействие в реализации эксперимента.

### ЛИТЕРАТУРА

1. W.Gawlik, J.Kowalski, R.Neumann, F.Trager. Opt. Commun., 12, 400 (1974).
2. S.Giraud-Cotton, V.P.Kaftandjian, L.Klein. Phys. Rev. A, 32, 2223 (1985).
3. B.Stahlberg, P.Jungner, T.Fellman, A.Lindberg. Appl. Phys. B, 50, 547 (1990).
4. A.Weis, J.Wurster, S.I.Kanorsky. J. Opt. Soc. Am. B, 10, 716 (1993).
5. Н.Г.Лукомский, В.А.Полищук, М.П.Чайка, Е.А.Алиппева. Опт. и спектр., 83, 420 (1997).
6. E.Arimondo. Progr. Opt., 35, 257 (1996).
7. A.M.Akulshin, A.A.Celikov, V.L.Velichansky. Opt. Commun., 84, 139 (1991).
8. O.Schmidt, R.Wynands, Z.Hussein, D.Meschede. Phys. Rev. A, 53, R27 (1996).
9. R.Holler, F.Renzoni, L.Windholz. J. Opt. Soc. Am. B, 14, 2221 (1997).
10. S.Brandt, A.Nagel, R.Wynands, D.Meschede. Phys. Rev. A, 56, R1063 (1997).
11. F.Renzoni, W.Maichen, L.Windholz, E.Arimondo. Phys. Rev. A, 55, 3710 (1997).

ՑԵԶԻՈՒՄԻ ՆՈՍԻ ԳՈԼՈՐՇԻՆԵՐԻ ԼԱԶԵՐԱՅԻՆ ՍՊԵԿՏՐԱՍԿՈՊԻԱՆ  
ԹՈՒՅԼ ՄԱԳՆԵՍԱԿԱՆ ԴԱՇՏՈՒՄ

Ա. Վ. ՊԱՊՈՅԱՆ, Գ. Ս. ՍԱՐԳՍՅԱՆ, Դ. Հ. ՍԱՐԳՍՅԱՆ

Էքսպերիմենտալ հետազոտվել է ցեզիումի նոսր գոլորշիներում (ատոմների խտությունը  $\sim 10^{11}$  սմ<sup>-3</sup>) գծային բևեռացած անընդհատ լազերային ճառագայթման կլանումը  $D_2$  ռեզոնանսային գծի գերնորր կառուցվածքի վրա: Ի հայտ է բերվել կլանման գործակցի էական կախումը արտաքին մագնիսական դաշտի մեծությունից ( $\sim 10^2$  Գ-ատա և բարձր) լազերային ճառագայթման 1 մՎտ/սմ<sup>2</sup>-ից բարձր ինտենսիվության դեպքում: Քննարկվում է դիտվող էֆեկտի հնարավոր կապը բնակվածությունների կոհերենտ գերման երևույթի հետ:

LASER SPECTROSCOPY OF DILUTE CESIUM VAPOR  
IN A WEAK MAGNETIC FIELD

A. V. PAPOYAN, G. S. SARKISYAN, D. H. SARKISYAN

An absorption of a linearly-polarized cw laser radiation in dilute cesium vapor (density of atoms  $\sim 10^{11}$  cm<sup>-3</sup>) on the hyperfine structure of  $D_2$  resonance line has been studied experimentally. An essential dependence of the absorption coefficient on magnitude of external magnetic field (above  $\sim 10^2$  Gs) was revealed at the laser radiation intensity over 1 mW/cm<sup>2</sup>. A possible relation of observed effect to the coherent population trapping phenomenon is discussed.

УДК 621.315.592

## СОСТОЯНИЕ ЭЛЕКТРОНА В РАЗМЕРНО-КВАНТОВАННОЙ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ ПРОВОЛОКЕ С ПОКРЫТИЕМ

М. М. АГАСЯН, А. А. КИРАКОСЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 5 августа 1998г.)

Рассмотрены состояния электрона в размерно-квантованной полупроводниковой проволоке, покрытой слоем другого полупроводника с большей, чем у проволоки, шириной запрещенной зоны, в предположении, что на внешней границе покрытия потенциал бесконечен (модель ступенчатой бесконечно глубокой потенциальной ямы – СБЯ). Найдены волновые функции, и получено уравнение для определения собственных значений энергии. Вариационным методом вычислена энергия связи водородоподобной примеси, находящейся на оси проволоки. Исследовано поведение энергетических уровней и энергии связи примеси в СБЯ из  $GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$  в зависимости от концентрации сплава  $x$  и отношения эффективных масс.

## 1. Введение

Исследования свойств полупроводниковых структур с низкоразмерным газом носителей заряда, в первую очередь, квазиодномерных (Q1D) и квазиульмерных (Q0D) электронных систем, продолжают оставаться на переднем крае физики твердого тела и физики полупроводников [1,2]. Особенно впечатляюще успехи современных технологий в области создания низкоразмерных электронных систем с различными геометрическими формами [3-6]. Фактически новой степенью свободы для низкоразмерных систем становится топология электронного газа [7-10].

В данной работе рассмотрена задача определения энергетического спектра и волновых функций электрона в размерно-квантованной полупроводниковой проволоке круглого сечения, покрытой слоем другого полупроводника с большей, чем у проволоки, шириной запрещенной зоны. Предполагается, что на внешней границе покрывающего проволоку цилиндрического слоя потенциал бесконечен (модель ступенчатой бесконечно глубокой ямы (СБЯ)). Во второй части работы исследовано влияние покрывающего проволоку слоя на энергию связи примесного центра, находящегося на оси проволоки.

Определению энергии связи водородоподобного центра в Q1D структурах посвящено много работ [11-17]. В частности, в [13] и [14] исследовано поведение энергии связи примесного центра в квантовой проволоке из  $GaAs$  круглого и прямоугольного сечений, соответственно, окруженной бесконечной средой из  $Ga_{1-x}Al_xAs$ , в зависимости от положе-



ния примесного центра. Было найдено, что энергия связи максимальна, когда примесь находится на оси проволоки. Из физических соображений очевидно, что как на уровне энергии электрона, так и на энергию связи примесного центра может оказать влияние также конечность толщины покрывающего слоя из-за возрастания влияния размерного квантования.

## 2. Волновые функции и спектр энергии

Рассмотрим состояния электрона в проволоке радиуса  $R_1$ , покрытой слоем толщины  $R_2 - R_1$ . В приближении эффективной массы гамильтониан задачи имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_i} + V(r), \quad (1)$$

где  $m_i$  – эффективная масса электрона в проволоке ( $i = 1$ ) и в слое ( $i = 2$ ),  $\hat{p}$  – оператор импульса, а потенциальная энергия  $V(r)$  в рамках рассматриваемой модели имеет вид

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r < R_1, \\ V_0, & R_1 \leq r \leq R_2, \\ \infty, & r > R_2, \end{cases} \quad (2)$$

где  $V_0$  – величина скачка потенциальной энергии на границе проволоки и покрывающего слоя.

Следует заметить, что применимость метода эффективной массы в системе  $GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$  связана с выяснением роли  $\Gamma - X$  смешивания. Согласно [6], для  $V$ - и  $T$ -образных 1D-систем указанный эффект начинает играть определяющую роль при значениях  $R < 50 \text{ \AA}$  и  $x > 0,5$ , что позволяет при использованных ниже значениях  $R_1$ ,  $R_2$  и  $x$  пренебречь  $\Gamma - X$  смешиванием.

Решения уравнения Шредингера с гамильтонианом (1) можно представить в следующей форме:

$$\Psi_{nmk}(y, \varphi, z) = \frac{C_1}{\sqrt{\pi R_1^2 L}} \exp[i(kz + m\varphi)] \begin{cases} J_m(\alpha_{nm}y), & y < y_1, \\ C_2 J_m(\beta_{nm}y) + C_3 K_m(\beta_{nm}y), & y_1 \leq y \leq y_2, \\ 0, & y > y_2, \end{cases} \quad (3)$$

где  $L$  – длина проволоки,  $k$  – волновое число,  $n, m$  – квантовые числа,  $J_m$  – функция Бесселя первого рода  $m$ -го порядка,  $I_m$  и  $K_m$  – модифицированные функции Бесселя соответственно второго и третьего рода порядка  $m$ , а также введены безразмерные параметры

$$y_1 = \frac{R_1}{a_B}, \quad y_2 = \frac{R_2}{a_B}, \quad \alpha_{nm} = \left( \frac{\varepsilon_{nm}}{E_R} \right)^{1/2}, \quad \beta_{nm} = \left[ \frac{m_2}{m_1} (v_0 - \alpha_{nm}^2) \right]^{1/2}, \quad v_0 = \frac{V_0}{E_R}, \quad (4)$$

$a_B$  – эффективный боровский радиус,  $E_R$  – эффективная ридберговская энергия в проволоке,  $\varepsilon_{nm}$  – собственные значения энергии поперечного

квантования. Входящие в (3) постоянные нормировки  $C_l$  ( $l = 1, 2, 3$ ) даются выражениями

$$C_1 = \left[ \int_0^1 J_m^2(\alpha_{nm} y_1 \tau) \tau d\tau + 2 \int_1^{y_2/y_1} [C_2 I_m(\beta_{nm} y_1 \tau) + C_3 K_m(\beta_{nm} y_1 \tau)]^2 \tau d\tau \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (5)$$

$$C_2 = \frac{J_m(\alpha_{nm} y_1) K_m(\beta_{nm} y_2)}{I_m(\beta_{nm} y_1) K_m(\beta_{nm} y_2) - I_m(\beta_{nm} y_2) K_m(\beta_{nm} y_1)}, \quad (6)$$

$$C_3 = -\frac{J_m(\alpha_{nm} y_1) I_m(\beta_{nm} y_2)}{I_m(\beta_{nm} y_1) K_m(\beta_{nm} y_2) - I_m(\beta_{nm} y_2) K_m(\beta_{nm} y_1)}. \quad (7)$$

Параметры  $\alpha_{nm}$ , т.е. собственные значения  $\varepsilon_{nm}$ , определяются из условия непрерывности логарифмической производной волновой функции при  $r = R_1$  (т.е.  $y = y_1$ ) и являются корнями уравнения

$$\frac{1}{m_1} \frac{d}{dy_1} \ln J_m(\alpha_{nm} y_1) = \frac{1}{m_1} \frac{d}{dy_1} \ln [I_m(\beta_{nm} y_1) K_m(\beta_{nm} y_2) - I_m(\beta_{nm} y_2) K_m(\beta_{nm} y_1)]. \quad (8)$$

### 3. Расчет энергии связи

Воспользуемся вариационным методом для определения энергии связи водородоподобного центра, находящегося на оси проволоки, потенциал которого

$$U(r, z) = -\frac{e^2}{\chi \sqrt{r^2 + z^2}}. \quad (9)$$

В (9) предположено, что проволока и покрытие имеют одинаковые диэлектрические постоянные ( $\chi_1 = \chi_2 = \chi$ ).

Следуя [13], пробную волновую функцию основного состояния будем искать в виде

$$\Psi_0 = N \exp[ikz - \lambda a_B \sqrt{y^2 + (z/a_B)^2}] \begin{cases} J_0(\alpha_{10} y), & 0 \leq y < y_1, \\ C_2 I_0(\beta_{10} y) + C_3 K_0(\beta_{10} y), & y_1 \leq y \leq y_2, \\ 0, & y > y_2, \end{cases} \quad (10)$$

где  $\lambda$  – вариационный параметр,  $N$  – постоянная нормировки, а  $C_2$  и  $C_3$  даются соответственно выражениями (6) и (7). После введения функций

$$f_j(y_1, \alpha, \gamma) = \int_0^1 J_0^2(\nu_1 \alpha t) K_j(2\gamma y_1 t) t^{j+1} dt, \quad (11)$$

$$g_j(y_1, y_2, \alpha, \gamma) = \int_0^{y_2/y_1} [C_2 I_0(\nu_1 \beta t) + C_3 K_0(\nu_1 \beta t)]^2 K_j(2\gamma y_1 t) t^{j+1} dt, \quad (12)$$

где  $\gamma = \lambda a$ ,  $\alpha = \alpha_{10}$  и  $\beta = \beta_{10}$ , приходим к следующему выражению для постоянной нормировки:

$$N = \{4\pi\alpha_B^3 y_1^3 [f_1(y_1, \alpha, \gamma) + g_1(y_1, y_2, \alpha, \gamma)]\}^{-1/2}. \quad (13)$$

Энергия связи примеси определяется как разность энергии основного состояния системы без примеси, т.е.  $\varepsilon_{10}$ , и энергии  $\varepsilon(R_1, R_2)$  основного состояния с примесью:

$$\varepsilon_B(y_1, y_2) = \varepsilon_{10} - \varepsilon(y_1, y_2). \quad (14)$$

Переходя к безразмерным параметрам согласно (4) и воспользовавшись выражениями (11) и (12), после некоторых преобразований для энергии связи получим:

$$\varepsilon_B(y_1, y_2) = -\gamma^2 + \frac{2}{y_1} \frac{f_0 + g_0}{f_1 + g_1} - \gamma \frac{(1 - m_1/m_2)}{f_1 + g_1} [J_0^2(y_1, \alpha) K_0(2\gamma y_1) - \gamma g_1]. \quad (15)$$

При  $m_1 = m_2$  и в пределе  $R_2 \rightarrow \infty$  из формулы (15) следует результат работы [13]. Если же  $m_1 \neq m_2$ , то при  $R_2 \rightarrow \infty$  из (15) получается выражение, отличающееся от полученного в [13] первым слагаемым в квадратных скобках, что означает, в свою очередь, уменьшение энергии связи по сравнению с полученным в [13] результатом.

#### 4. Обсуждение результатов

Численные расчеты проведены в основном для проволоки из  $GaAs$ , покрытой слоем из  $Ga_{1-x}Al_xAs$ . Были использованы следующие значения параметров [17]:  $m_1 = 0.067m_0$ ,  $m_2 = (0.067 + 0.083x)m_0$  при изменении концентрации сплава  $x$  в пределах  $0 \leq x \leq 0.45$ ,  $m_0$  — масса свободного электрона,  $V_0 = 1.247xQ_e$  (эВ),  $Q_e$  — доля разрыва потенциальной энергии, приходящая на зону проводимости,  $E_R \approx 5.2$  мэВ,  $\alpha_B \approx 104 \text{ \AA}$ .

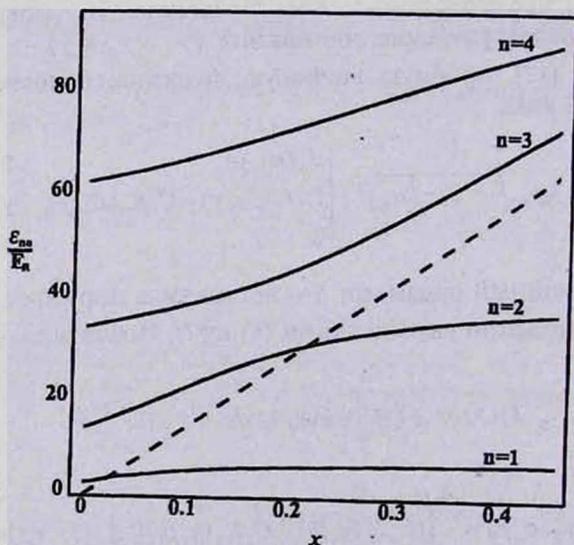


Рис.1. Зависимость энергетических уровней  $\varepsilon_{n0}$  от концентрации сплава  $x$ . Прерывистая прямая обозначает высоту потенциального барьера.

На рис.1 представлена зависимость первых четырех энергетических уровней  $\varepsilon_{n0}$  от концентрации  $x$  Al при значении радиуса проволоки  $R_1 = 0.75a_B$  и радиуса покрывающего слоя  $R_2 = 1.5a_B$  при  $Q_e = 0.6$ . Для значений  $x \geq 0.0225$  уровень  $\varepsilon_{10}$  "входит" в яму и с ростом  $x$ , из-за поднятия потенциального барьера, "поднимается". Однако увеличение  $\varepsilon_{10}$  с ростом  $x$  замедляется ввиду того, что в области покрытия  $m_2 > m_1$ . При значениях  $x \geq 0.21$  в яму "входит" уровень с энергией  $\varepsilon_{20}$ , которая в зависимости от  $x$  растет быстрее, чем  $\varepsilon_{10}$ . В рассматриваемой области  $0 \leq x \leq 0.45$  уровни  $\varepsilon_{30}$  и  $\varepsilon_{40}$  находятся вне ямы. Прерывистая прямая на рис.1 представляет зависимость высоты потенциального барьера от  $x$ .

На рис.2 представлена зависимость  $\varepsilon_{n0}$  от радиуса проволоки  $R_1$  при фиксированном радиусе покрытия  $R_2 = 1.5a_B$  для значения  $x = 0.4$  и  $Q_e = 0.6$ . В каждой паре кривых верхняя (прерывистая) соответствует случаю  $m_1 = m_2$ . При  $R_1 = 0$   $\varepsilon_{n0}$  совпадают (с учетом  $V_0$ ) с уровнями энергии в проволоке из  $Ga_{1-x}Al_xAs$  с радиусом  $R_2 = 1.5a_B$ . С увеличением  $R_1$  электрон "падает" в яму, и  $\varepsilon_{10}$  стремится к значению первого энергетического уровня в проволоке из  $GaAs$  с радиусом  $R_2$ , т.е. к значению  $2.52E_R \approx 13.1$  мэВ. Уровни энергии проявляют тенденцию к росту, что особенно заметно для больших  $n$ , и при стремлении  $R_1$  к  $R_2$  проходят через минимум. Такое поведение уровней энергии есть результат двух конкурирующих факторов: увеличения ширины ямы из  $GaAs$ , приводящего к понижению уровней, и увеличения массы в области барьера, приводящего к их повышению. Модельный расчет в предположении  $m_1 = m_2$  (пунктирная кривая) обнаруживает отсутствие немонотонных участков на кривых  $\varepsilon_{n0}(R_1)$ .

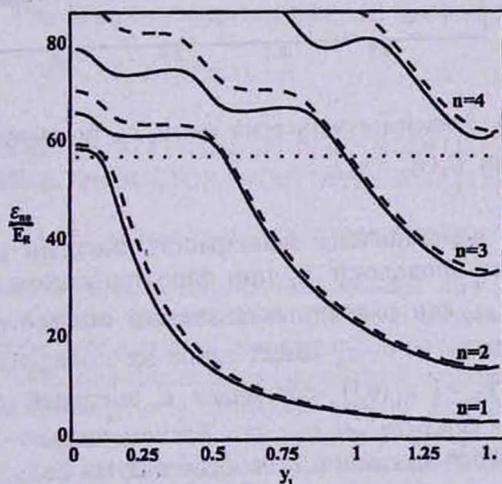


Рис.2. Зависимость энергетических уровней  $\varepsilon_{n0}$  от радиуса проволоки  $R_1$  ( $R_2 = 1.5a_B$ ,  $x = 0.4$ ,  $Q_e = 0.6$ ). Прерывистые кривые соответствуют предположению  $m_1 = m_2$ .

Влияние различия масс в проволоке и в области барьера на осцилляции энергетических уровней особенно четко проявляется в системе, состоящей из проволоки  $\beta$ -HgS и покрытия из CdS, эффективная масса электрона в которых равна соответственно  $m_1 = 0.036m_0$  и  $m_2 = 0.2m_0$  [7]. Из расчетов, выполненных для  $R_2 = 1.5a_B$ , очевидно усиление осцилляций  $\varepsilon_{n0}(R_1)$  для состояний вне ямы, а также четкое проявление минимумов в области  $R_1 \leq R_2$ .

Найдена зависимость уровней энергии  $\varepsilon_{n0}$  от радиуса покрывающего слоя для системы GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As при значениях параметров  $R_1 = a_B, x = 0.4, Q_e = 0.6$ . При значении  $R_2 = R_1$  уровни  $\varepsilon_{n0}$  совпадают с уровнями энергии в бесконечно глубокой потенциальной яме из GaAs с радиусом  $R_1 = a_B$ . С ростом  $R_2$   $\varepsilon_{n0}(R_2)$  уменьшается, т.к. вследствие туннелирования в область барьера увеличивается размер области локализации электрона. При  $R_2 = 1.25a_B$  значение  $\varepsilon_{10}(R_2)$  практически совпадает с асимптотическим значением  $\varepsilon_{10}(R_2 \rightarrow \infty)$ . С увеличением номера энергетического уровня значения  $R_2$ , соответствующие выходу  $\varepsilon_{n0}(R_2)$  на асимптоту, смещаются в сторону больших значений.

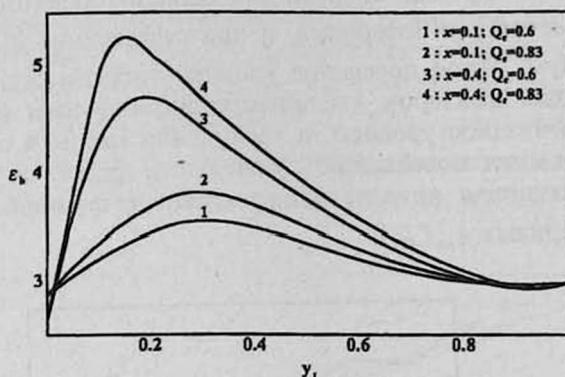


Рис.3. Зависимость энергии связи  $\varepsilon_b$  от радиуса проволоки  $R_1$  ( $R_2 = a_B$ ).

На рис.3 представлена зависимость энергии связи примесного центра от радиуса проволоки  $R_1$  при фиксированном значении радиуса покрытия  $R_2 = a_B$ , для различных значений концентрации сплава  $x$  и параметра  $Q_e$ . При  $y_2 \rightarrow \infty$   $\varepsilon_b$  имеет такое же поведение, как в [13]. Для значений  $y_1 = 0, y_2 = 1$   $\varepsilon_b(0,1)$  совпадает с энергией связи примеси в проволоке из GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As с бесконечным ограничивающим потенциалом. Малые значения  $\varepsilon_b$  соответствуют большим значениям  $x$ , т.к. с увеличением  $x$  масса электрона увеличивается. В области  $0.15 \leq y_1 \leq 0.3$   $\varepsilon_b(y_1,1)$  имеет максимум, далее, с возрастанием  $y_1$  уменьшается, достигая минимума в области  $0.8 \leq y_1 \leq 0.9$ . Однако, в отличие от случая  $y_2 \rightarrow \infty$ ,  $\varepsilon_b(y_1,1)$  убывает медленно, т.к.  $\varepsilon_{10}$  в упомянутой области

уменьшается медленнее, чем соответствующий энергетический уровень в случае  $y_2 \rightarrow \infty$ . Энергия связи  $\varepsilon_s(y_1, 1)$  достигает значения  $\varepsilon_s(y_1 = y_2 = 1)$ , которое соответствует энергии связи примесного центра в проволоке из *GaAs* с радиусом  $a_b$  и с бесконечным ограничивающим потенциалом.

Для фиксированного значения  $R_1$   $\varepsilon_s(y_1, y_2)$  имеет максимум при  $y_1 = y_2$  и затем резко падает, стремясь к значению, полученному в [13] при  $y_2 \rightarrow \infty$ . Кривые, соответствующие большим значениям  $V_0$  (в зависимости от  $x$  и  $Q_s$ ), убывают сравнительно медленно.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Nanostructures and Quantum Effects, ed. by H.Sakaki and H.Noge, Springer-Verlag, Heidelberg, 1993.
2. Optical Properties of Semiconductor Quantum Dots, ed. by U.Woggon, Springer-Verlag, Heidelberg, 1997.
3. W.Wegschneider, L.N.Pfeiffer, M.M.Dignam, A.Pinchuk, K.W.West, S.L.McCall, and R.Hull. Phys. Rev. Lett, 71, 4071 (1993).
4. H.Akiyama, T.Someya, and H.Sakaki. Phys. Rev. B, 53, R10520 (1996).
5. H.Akiyama, T.Someya, and H.Sakaki. Phys. Rev. B, 53, R4229 (1996).
6. S.Pescetelli, A.Di Carlo, and P.Lugli. Phys. Rev. B, 56, R1668 (1997).
7. Н.В.Ткач, И.В.Пронин, А.М.Маханец. ФТТ, 40, 557 (1998).
8. C.L.Foden, M.L.Leadbeater, J.H.Burroughes, and M.Pepper. J. Phys. Cond. Mat., 6, L127 (1994).
9. C.L.Foden, M.L.Leadbeater, and M.Pepper. Phys. Rev. B, 52, R8646 (1995).
10. Jeongnim Kim, Lin-Wang Wang, and A.Zunger. Phys. Rev. B, 56, R15541 (1997).
11. J.A.Brum. Solid State Commun., 54, 179 (1985).
12. G.W.Bryant. Phys. Rev. B, 31, 7812 (1985).
13. J.W.Brown and H.N.Spector. J. Appl. Phys., 59, 1179 (1986).
14. F.A.P.Osorio, M.H.Degani, and O.Hipolito. Phys. Rev. B, 37, 1402 (1988).
15. G.Weber, P.A.Schulz, and L.E.Oliweira. Phys. Rev. B, 38, 2179 (1988).
16. Zhen-Yan Deng, Ting-Rong Lai, Jing-Lun Guo, and Shi-Wei Gu. J. Appl. Phys., 75, 7389 (1994).
17. S.Adachi. J. Appl. Phys., 58, R1 (1985).

## ELECTRON STATES IN SIZE-QUANTIZED SEMICONDUCTOR WIRE WITH COATING

M. M. AGHASYAN, A. A. KIRAKOSYAN

The electron states in a size-quantized semiconductor wire with a semiconductor coating having greater than the wire forbidden band width are considered assuming that confining potential on the coating external boundary is infinite (the staircase infinitely well model - SIW). The wave functions are found and the equation is obtained for defining energy eigenvalues. The binding energy of a hydrogenic impurity located on the wire axis is calculated using the variational approach. The behavior of energy levels and the binding energy of impurity in the *GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As* SIW is investigated depending on the alloy concentration  $x$  and the effective-mass ratio.

УДК 621.315.592

## РЕЛЯТИВИСТСКИЙ АТОМ ВОДОРОДА В СИЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

А. А. АВETИСЯН, А. П. ДЖОТЯН, Э. М. КАЗАРЯН,  
А. А. САРКИСЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 7 июля 1998г.)

Определены уровни энергии релятивистского атома водорода в сильном магнитном поле. Показано, что учет релятивизма приводит к монотонному росту энергии связи основного состояния с ростом магнитного поля, более быстрому, чем в нерелятивистском случае.

### 1. Введение

Необходимость дальнейшего исследования водородоподобных систем, имеющих в физике полупроводников непосредственный выход в физику примесных и экситонных состояний, диктуется потребностями и прогрессом современной полупроводниковой электроники и чисто научным интересом к специфике этих состояний в наиболее актуальных ее объектах – 0D, 1D и 2D системах [1,2], а также к их поведению во внешних электрическом и магнитном полях [3-5]. Подобные исследования представляют интерес также для астрофизики и физики плазмы.

Как известно, в полупроводниках экстремально сильные магнитные поля, приводящие к "игольчатой" структуре атома водорода, из-за малости эффективной массы носителей заряда реализуются уже при величинах  $H \sim 10^5$  Э. Ситуация здесь во многом аналогична той, которая имеет место в 1D системах (тонких полупроводниковых проволоках при толщинах, меньших боровского радиуса экситона.

При квадратичном законе дисперсии уровни энергии атома водорода в сильном магнитном поле, при  $a_H \ll a_B$  ( $a_H$  – магнитная длина,  $a_B = \hbar^2 / me^2$  – боровский радиус) определены в работе [6]. Между тем, закон дисперсии носителей заряда в наиболее часто используемых в микроэлектронике полупроводниковых соединениях  $A^3B^5$  существенно непараболический (закон дисперсии Кейна [7], аналогичный релятивистскому в двухзонном приближении). В связи с этим представляет интерес решение аналогичной задачи с релятивистским законом дисперсии носителей заряда. Нами обсуждается также вопрос применения полученных результатов для случая мелких примесных и экситонных состояний в кейновском полупроводнике.

## 2.1. Энергия связи основного состояния релятивистского атома водорода в сильном магнитном поле

Уравнение Клейна-Гордона для релятивистского электрона в поле ядра в присутствии магнитного поля  $H$  имеет вид

$$\left[ \left( \hat{\mathbf{P}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 c^2 + m_0^2 c^4 \right] \psi = \left( \varepsilon + \frac{e^2}{r} \right)^2 \psi, \quad (1)$$

где  $\mathbf{A}$  – вектор-потенциал поля,  $m_0$  – масса покоя,  $\varepsilon$  – энергия электрона. При  $H \parallel OZ$  и выборе  $\mathbf{A} = (A_\varphi = H\rho/2, A_z = A_r = 0)$  уравнение (1) в цилиндрических координатах запишется как

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial \psi}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right] - \frac{i\hbar\omega_H}{2} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} + \\ + \frac{m_0\omega_H\rho^2}{8} \psi + U(r)\psi = \frac{\varepsilon^2 - m_0^2 c^4}{2m_0 c^2} \psi, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $\omega_H = \frac{eH}{m_0 c}$ , а роль потенциальной энергии играет функция

$$U(r) = -\frac{e^2 \varepsilon}{m_0 c^2 r} - \frac{e^4}{2m_0 c^2 r^2}. \quad (3)$$

При поставленном условии  $a_H \ll a_B$  влияние кулоновского поля ядра на движение электрона в поперечной к  $H$  плоскости можно рассматривать как малое возмущение [6,8], не меняющее дискретного характера энергетического спектра в плоскости  $ХОУ$ . Соответственно при разделении переменных в уравнении (2) радиальные функции берем в прежнем виде [6,8]; низшему уровню отвечают значения квантовых чисел  $n_\rho = m = 0$ . Подставив в уравнение (2)  $\psi = R_{00}(\rho)X_0(z)$ , умножив затем это уравнение на  $R_{00}(\rho)$  и проинтегрировав по  $\rho d\rho$ , получим для  $X_0(z)$  одномерное уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} X_0''(z) + \bar{U}(z)X_0(z) = \varepsilon_{z0} X_0(z), \quad (4)$$

где  $\varepsilon_{z0}$  – энергия наинизшего кулоновского уровня

$$\varepsilon_{z0} = \frac{\varepsilon_0^2 - m_0^2 c^4}{2m_0 c^2} - \frac{\hbar\omega_H}{2}, \quad (5)$$

соответствующая энергии  $\varepsilon_0$  основного состояния системы, а

$$\bar{U}(z) = \int_0^\infty U(\sqrt{z^2 + \rho^2}) R_{00}^2(\rho) \rho d\rho. \quad (6)$$

Для дискретного уровня энергии  $\varepsilon_{z0}$ , согласно [8], имеем

$$\varepsilon_{z=0} = -\frac{m_0}{2\hbar^2} \left[ \int_0^\infty \bar{U}(z) dz \right]^2. \quad (7)$$

В соответствии с (3)  $\bar{U}(z)$  представим в виде

$$\bar{U}(z) = \bar{U}_1(z) + \bar{U}_2(z) = -\frac{e^2 \varepsilon}{m_0 c^2} \int_0^\infty \frac{R_0^2(\rho) \rho d\rho}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} - \frac{e^4}{2m_0 c^2} \int_0^\infty \frac{R_{00}^2(\rho) \rho d\rho}{(\rho^2 + z^2)}. \quad (8)$$

После интегрирования для  $\bar{U}_1(z)$  и  $\bar{U}_2(z)$  получаем

$$\bar{U}_1(z) = -\frac{e^2 \varepsilon}{m_0 c^2} \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{2a_H}} e^{\frac{z^2}{2a_H^2}} \left[ 1 - \Phi\left(\frac{z}{\sqrt{2a_H}}\right) \right], \quad (9)$$

$$\bar{U}_2(z) = \frac{e^4}{4m_0 c^2 a_H^2} e^{\frac{z^2}{2a_H^2}} \text{Ei}\left(-\frac{z^2}{2a_H^2}\right), \quad (10)$$

где  $\Phi(x)$  – интеграл вероятности, а  $\text{Ei}(x)$  – интегральная показательная функция [9].

Используя выражения (9)-(10), из (7) и (5) находим уравнение для определения энергии основного состояния системы:

$$\frac{\varepsilon_0^2 - m_0^2 c^4}{2m_0 c^2} - \frac{\hbar \omega_H}{2} = -\frac{m_0}{2\hbar^2} \left[ \frac{2e^2 \varepsilon_0}{m_0 c^2} \ln \frac{a_B}{a_H} + \frac{e^4 \pi^{3/2}}{2\sqrt{2m_0 c^2 a_H}} \right]^2. \quad (11)$$

Физический смысл имеет лишь следующее решение уравнения (11):

$$\varepsilon_0 = \frac{-(2\pi)^{3/2} \alpha^2 R_0 x \ln x + \sqrt{4m_0 c^2 (m_0 c^2 + \hbar \omega_H) (1 + 4\alpha^2 \ln^2 x) - 2\alpha^2 \pi^3 R_0^2 x^2}}{2(1 + 4\alpha^2 \ln^2 x)}, \quad (12)$$

где  $x = a_B/a_H$ ,  $\alpha = e^2/\hbar c$ ,  $R_0 = m_0 e^4/2\hbar^2$ .

Для энергии  $\varepsilon_{z=0}$  находим

$$\begin{aligned} \varepsilon_{z=0} = & \{2(2\pi)^{3/2} \alpha^2 R_0 x \ln x \times \\ & \times [2^{1/2} \pi^{3/2} \alpha^2 R_0 x \ln x - \sqrt{4m_0 c^2 (m_0 c^2 + \hbar \omega_H) (1 + 4\alpha^2 \ln^2 x) - 2\alpha^2 \pi^3 R_0^2 x^2}] - \\ & - 16\alpha^2 m_0 c^2 (m_0 c^2 + \hbar \omega_H) (1 + 4\alpha^2 \ln^2 x) \ln^2 x - 2\alpha^2 \pi^3 R_0^2 x^2\} \times \\ & \times [8m_0 c^2 (1 + 8\alpha^2 \ln^2 x + 16\alpha^2) \ln^4 x]^{-1}. \end{aligned} \quad (13)$$

В пределе при  $\alpha \rightarrow 0$  ( $c \rightarrow \infty$ ) из (13) получаем выражение для энергии связи основного состояния в нерелятивистском случае:

$$\varepsilon'_{z=0} = -\frac{2m_0 e^4}{\hbar^2} \ln^2 \frac{a_B}{a_H}. \quad (14)$$

Графики функций  $\varepsilon_{z=0}(x)$  и  $\varepsilon'_{z=0}(x)$  приведены на рис.1.

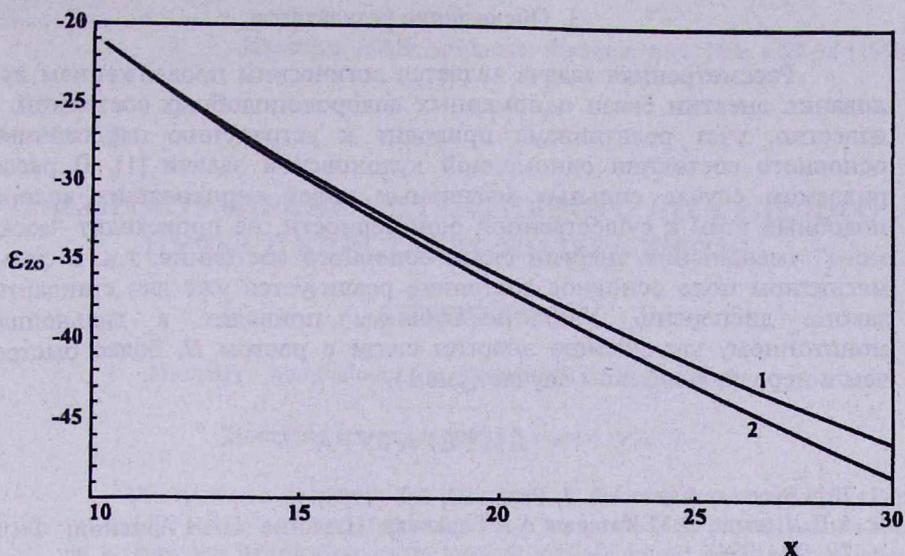


Рис.1. Зависимость энергии связи основного состояния атома водорода как функция от  $x = a_B / a_H$  (в единицах  $R_0 = m_0 e^4 / 2 \hbar^2$ ): 1) для нерелятивистского атома водорода; 2) для релятивистского атома водорода.

Для возбужденных состояний ( $z \sim a_B \gg \rho$ ) получаем одномерное уравнение Клейна-Гордона

$$X'' + \frac{1}{\hbar^2 c^2} \left[ \varepsilon^2 + \frac{2e^2 \varepsilon}{z} + \frac{e^4}{z^2} - m_0^2 c^2 \hbar \omega_H \right] X = 0,$$

по форме совпадающее с уравнением, рассмотренным в [1].

## 2.2. Примесные состояния в полупроводнике с узкой запрещенной зоной

Полученные в 2.1 результаты могут быть непосредственно распространены и обобщены для случая мелких примесных и экситонных состояний в полупроводниках с кейновским законом дисперсии (двухзонное приближение). В случае неподвижного примесного центра налицо полная аналогия с задачей атома водорода при замене скорости света  $c$  на характерный для полупроводников  $A^3B^5$  параметр  $s$  ( $s = 10^8$  м/с), описывающий "взаимодействие" зон, массы покоя электрона  $m_0$  – на эффективную массу  $m^*$ , заряда  $e$  – на эффективный заряд  $e^* = e / \sqrt{\chi}$  ( $\chi$  – диэлектрическая проницаемость полупроводника) и постоянной тонкой структуры  $\alpha$  – на  $\alpha^* = e^2 / \hbar s$ .

Благодаря равенству эффективных масс электрона и дырки в используемом двухзонном приближении, уравнение для экситонных состояний после перехода к системе центра масс приводится к идентичному с (1) для частицы с массой  $m^* / 2$  и зарядом  $e^* / 2$ .

### 3. Обсуждение результатов

Рассмотренная задача является логическим продолжением исследования энергии связи одномерных водородоподобных состояний. Как известно, учет релятивизма приводит к устранению неустойчивости основного состояния одномерной кулоновской задачи [1]. В рассматриваемом случае сильных магнитных полей, приводящих водородоподобный атом к существенной одномерности, не происходит “ожидаемого” уменьшения энергии связи основного состояния, т.к. в сильном магнитном поле основное состояние реализуется уже для стандартного закона дисперсии. Учет релятивизма приводит к дальнейшему, монотонному увеличению энергии связи с ростом  $H$ , более быстрому, чем в нерелятивистском случае (рис.1).

### ЛИТЕРАТУРА

1. H.N.Spector, J.Lee. Am. J. Phys., 53, 248 (1985).
2. А.П.Джотян, Э.М.Казарян, А.А.Саркисян. Известия НАН Армении, Физика, 29, 90 (1994).
3. M.Bayer, P.Ils, M.Michel, and A.Forchel. Phys. Rev. B, 53, 4668 (1996).
4. D.Vin, R. Del Sole. Solid State Commun., 97, 985 (1996).
5. P.W.Barmby, J.L.Dunn and C.A.Bates. Phys. Rev. B, 54, 8586 (1996).
6. R.J.Elliott and R.Loudon. J. Phys. Chem. Sol., 15, 196 (1960).
7. Е.О.Кане. J. Phys. Chem. Sol., 1, 249 (1957).
8. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика, М., Наука, 1989.
9. И.С.Градштейн, И.М.Рыжик. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М., Физматгиз, 1962.

### ՋՐԱԾՆԻ ՌԵԼԱՏՎԻՍՏԻՍՏԱԿԱՆ ԱՏՈՄԸ ՈՒԺԵՂ ՄԱԳՆԵՒՍԱԿԱՆ ԴԱՐՏՈՒՄ

Ա. Ա. ԱՎԵՏԻՍՅԱՆ, Ա. Պ. ՋՈԹՅԱՆ, Է. Մ. ԴԱԶԱՐՅԱՆ, Է. Ա. ՍԱՐԳՍՅԱՆ

Որոշված են ռելյատիվիստական ջրածնի ատոմի էներգիայի մակարդակները ուժեղ մագնիսական դաշտում: Ցույց է տրված, որ ռելյատիվիզմը բերում է մագնիսական դաշտից կապի էներգիայի կախվածության ավելի արագ աճին, քան ոչ ռելյատիվիստական դեպքում:

### RELATIVISTIC HYDROGEN ATOM IN A HIGH MAGNETIC FIELD

A. A. AVETISYAN, A. P. DJOTYAN, E. M. KAZARYAN, H. A. SARKISYAN

Energy levels of a relativistic hydrogen atom in a high magnetic field have been studied. The account of relativity causes a monotonous increase of the binding energy of the ground state with the magnetic field increase, which is more rapid, than in the nonrelativistic case.

УДК 535.375

## РАСПРОСТРАНЕНИЕ ИНТЕНСИВНОГО БЕССЕЛЕВОГО ПУЧКА В КРИСТАЛЛЕ ЙОДАТА ЛИТИЯ

К. З. ГРИГОРЯН

Институт физических исследований НАН Армении

(Поступила в редакцию 10 марта 1998г.)

Обнаружено явление восстановления Бесселевого пучка в кристалле  $\text{LiIO}_3$ , суть которого заключается в том, что если перекрыть на входе в кристалл некоторую часть кольца, образующего Бесселевский пучок, то на выходе наблюдается восстановление обрезанной части кольца. Явление восстановления интерпретировано дифракцией пучка на нитевидном повреждении, возникающем в кристалле при прохождении интенсивного пучка. Интерпретация дана в рамках геометрической теории дифракции.

Бесселевы пучки (БП) являются новым классом решений скалярного волнового уравнения [1,2]. Распределение поля Бесселевого пучка нулевого порядка, распространяющегося вдоль оси  $z$ , определяется выражением

$$E(x, y, z, t) = \exp[i(\beta z - \alpha t)] \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp[i\alpha(x \cos \varphi + y \sin \varphi)] d\varphi = \exp[i(\beta z - \alpha t)] J_0(\alpha \rho), \quad (1)$$

где  $\alpha = k \sin \gamma$ ,  $\beta = k \cos \gamma$  – поперечная и продольная компоненты волнового вектора, соответственно,  $\rho^2 = x^2 + y^2$ ,  $J_0(\alpha \rho)$  – функция Бесселя нулевого порядка, первого класса [1]. Бесселевский пучок нулевого порядка можно представить как суперпозицию плоских волн одинаковой амплитуды, волновые векторы которых расположены на поверхности конуса и образуют угол  $\gamma$  с осью распространения. Интерференция этих плоских волн приводит к формированию узкого максимума по оси распространения. Ширина максимума идеального Бесселевого пучка определяется выражением  $d = 0.766\lambda/\sin \gamma$  [1,2]. Поперечное распределение поля остается одним и тем же в любой плоскости, перпендикулярной к оси распространения. В эксперименте БП формируют различными методами, например, применением кольцевой щели, помещенной в фокальной плоскости собирающей линзы [2], с помощью зонной пластинки [3,4], аксикона [5]. Физически реализуемый БП сохраняет основные свойства идеального пучка только на определенной длине

$Z_{\max} = R/\operatorname{tg} \gamma$ , где  $Z_{\max}$  – длина области существования БП,  $R$  – радиус апертуры элемента, используемого для формирования пучка,  $\gamma$  – угол конуса БП [1,2]. В последнее время появилось много работ, посвященных изучению нелинейных явлений в поле Бесселевых пучков [4-10]. Интерес к использованию БП в нелинейной оптике обусловлен рядом характерных особенностей, являющихся следствием неколлинеарного взаимодействия бесконечно большого числа плоских волн в узкой и протяженной области. К числу их относятся: подавление фазовой самомодуляции в поле БП [6,7], угловое разделение накачки и рассеянного излучения, возможность перестройки частоты вынужденного комбинационного рассеяния на поляритонах [5]. Недавно было обнаружено явление самовосстановления БП в органических жидкостях [8]. Целью настоящей работы была попытка обнаружить это явление в кристалле  $\text{LiIO}_3$ .

В качестве возбуждающего излучения использовался цуг импульсов лазера АИГ:Nd с пассивной синхронизацией мод. Цуг состоял из 5-6 импульсов длительностью 30 пс каждый, с интервалом между ними 6,7 нс. Схема экспериментальной установки приведена на рис.1. Излучение лазера преобразовывалось во вторую гармонику с помощью кристалла КДП. Длина волны второй гармоники  $\lambda = 532$  нм, энергия излучения была порядка 1 мДж, мощность 6-8 МВт. Для формирования Бесселевого пучка применялся аксикон с углом при основании  $\delta = 15^\circ$ , который обеспечивал угол конуса БП  $\gamma = 7,4^\circ$  (в воздухе). Это следует из соотношения между углом при основании аксикона  $\delta$  и углом конуса  $\gamma$  [5]

$$\sin \gamma = (n-1) \operatorname{tg} \delta, \quad (2)$$

где  $n$  – показатель преломления аксикона ( $n = 1,48$ ). Мы использовали у-срез кристалла  $\text{LiIO}_3$  длиной 3,5 см. Пространственное распределение регистрировалось фотографически.

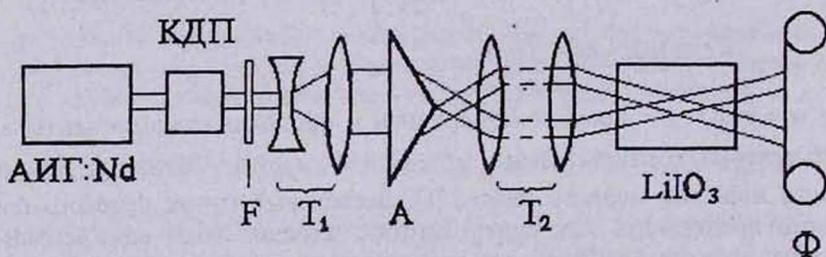
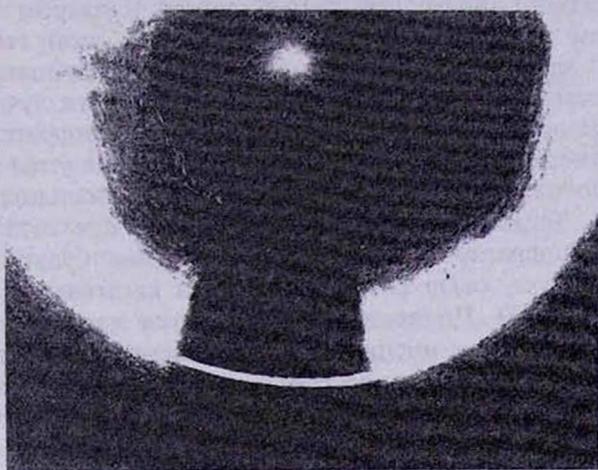


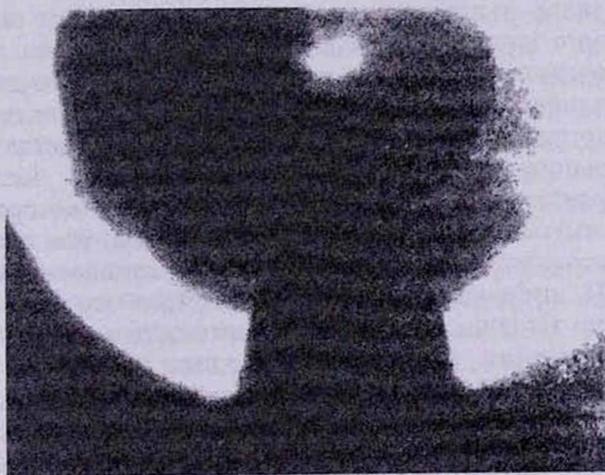
Рис.1. Экспериментальная установка. F – фильтр, отсекающий излучение основной частоты,  $T_1$  – расширяющий телескоп, A – аксикон,  $T_2$  – проецирующий телескоп, Ф – фотоаппарат.

В кристалле  $\text{LiIO}_3$  явления самовосстановления, подобного обнаруженному в жидкостях, не наблюдалось вплоть до интенсивности пучка, равной порогу ВКР (близкой к порогу оптического разрушения) (рис.2а). Однако был обнаружен другой тип восстановления. Суть этого явления заключается в следующем. При прохождении интенсивного БП, близкого к порогу оптического разрушения, в кристалле наблюдается

вынужденное комбинационное рассеяние (ВКР) на поляритонах, связанных с полносимметричным колебанием  $795 \text{ см}^{-1}$  [5]. По оси конуса БП генерировалось интенсивное стоксовое излучение ВКР на длине волны  $\lambda_s = 554 \text{ нм}$  [5]. По истечении 10-20 лазерных вспышек интенсивность стоксового излучения ВКР начинает ослабевать, качество стоксового пучка ухудшается и в кристалле появляются повреждения. Если на этой стадии перекрыть на входе в кристалл некоторую часть кольца, образующего БП, то на выходе наблюдается восстановление обрезанной части кольца (рис.2б). Восстановление не зависит от интенсивности освещающего пучка. При уменьшении интенсивности освещающего пучка



а



б

Рис.2. Распределение интенсивности БП в дальней зоне, с блокированным азимутальным участком. а) Интенсивность пучка ниже порога ВКР: восстановление отсутствует. б) Интенсивность выше порога ВКР: обрезанная часть кольца восстанавливается после прохождения через кристалл.

в 10-20 раз восстановление можно было наблюдать в течение неограниченного времени. Восстановление кольца очень чувствительно и к разъюстировке оптической системы: небольшое смещение кристалла относительно первоначального положения приводит к исчезновению восстановления части кольца. Явление восстановления удается наблюдать при блокировании лишь ограниченной части кольца, примерно  $50^{\circ}$ - $70^{\circ}$  азимутального угла.

Явление восстановления кольца БП качественно можно интерпретировать дифракцией обрезанного пучка на нитевидном повреждении на оси конуса, возникающем в кристалле при прохождении интенсивного БП. Наиболее наглядным является объяснение в рамках геометрической теории дифракции, разработанной Келлером и основанной на обобщенном принципе Ферма [11]. Согласно этой теории, когда луч падает на край препятствия, то возникают дополнительные лучи, которые называют дифрагировавшими лучами. Эти лучи удовлетворяют закону красовой дифракции, согласно которому дифрагировавший луч и соответствующий падающий луч образуют равные углы с краем и лежат в противоположных сторонах от плоскости, нормальной к краю в точке дифракции. Таким образом, один падающий луч создает бесконечное множество дифрагировавших лучей, которые будут лежать на поверхности конуса, осью которого является касательная к краю в точке дифракции (рис.3). Половинный угол конуса  $\gamma$  равен углу между падающим лучом и краем препятствия. Положения геометрической теории дифракции экспериментально были проверены и подтверждены в работах [12,13]. В нашем случае плоские волны, составляющие БП, дифрагируют на нитевидном повреждении и порождают дифрагировавшие волны вдоль поверхности конуса БП и тем самым приводят к восстановлению заблокированного азимутального участка кольца. Отметим, что вклад в интенсивность дифрагировавшего света для любого азимутального направления вдоль поверхности конуса дают все составляющие волны необрезанной части БП. Резкая чувствительность процесса восстановления относительно разъюстировки оптической системы обусловлено тем, что при небольшом смещении кристалла относительно первоначального положения, обрезанный пучок уже не пересекает узкую поврежденную область кристалла, ширина которой порядка ширины максимума БП, не дифрагирует на нем и, как следствие, восстановление исчезает. Отсутствие в кристалле самовосстановления интенсивного БП, наблюдавшегося в органических жидкостях [8], обусловлено, на наш взгляд, следующим обстоятельством. Согласно [8], явление самовосстановления БП в исследованных жидкостях есть результат самодифракции БП, вызванной нелинейным изменением показателя преломления в узкой и протяженной области на оси конуса, где интенсивность излучения имеет острый максимум. Физическим механизмом, ответственным за индуцированное светом изменение показателя преломления в исследованных жидкостях, является ориентация анизотропных молекул в электрическом поле световой волны. В пользу этого механизма свидетельствует тот факт, что самовосстановлению БП в жидкостях предшествует (по порогу интенсивности) генерация вдоль оси конуса излучения на практически несмещенной частоте (на частоте возбуждающего излучения). Это излучение было интерпретировано

авторами [8] как вынужденное рассеяние в крыле линии Релея. Как известно [14], этот вид вынужденного рассеяния обусловлен ориентацией молекул, вызванной интенсивной световой волной, и поэтому легко наблюдается в жидкостях, но не в кристаллах.

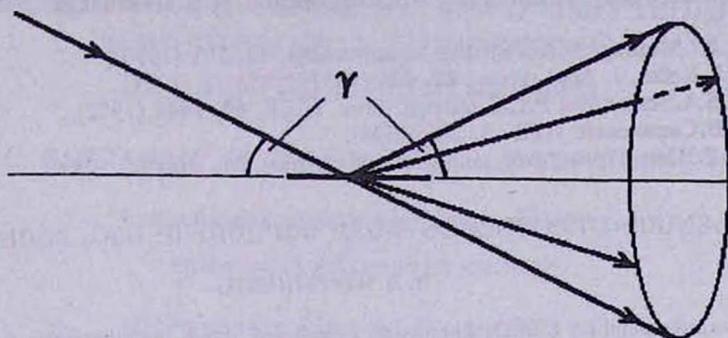


Рис.3. Образование конуса дифрагировавших лучей при падении плоской волны на нитевидное препятствие.

Отметим также, что в наших экспериментах с кристаллом  $\text{LiIO}_3$  единственным явлением, предшествующим оптическому разрушению, было поляритонное ВКР. Какого-либо излучения на несмещенной частоте вдоль оси конуса БП не наблюдалось. Для проверки утверждения о том, что явление восстановления происходит из-за дифракции пучка на нитевидном повреждении, был проведен контрольный эксперимент. В качестве нитевидного препятствия в эксперименте использовались тонкая металлическая проволока или кварцевое волокно. Луч от He-Ne лазера направлялся на препятствие под различными углами. Диаметры препятствия и освещающего пучка были почти одинакового размера. После падения луча на препятствие возникало множество дифрагировавших лучей, которые лежали на поверхности конуса, осью которого являлась ось препятствия. На экране, который ставился перпендикулярно плоскости препятствия и пучка, наблюдалось кольцо. При изменении угла падения луча на препятствие, диаметр кольца также изменялся.

В заключение отметим, что в кристалле  $\text{LiIO}_3$  был обнаружен другой тип восстановления БП, отличающийся от явления самовосстановления в органических жидкостях. Это явление объясняется дифракцией пучка на повреждении, возникающем в кристалле при прохождении интенсивного БП. Такая интерпретация удовлетворительно согласуется с геометрической теорией дифракции.

Выражаю благодарность С.Б.Согомоняну за помощь, оказанную при проведении этой работы, и за полезные обсуждения.

## ЛИТЕРАТУРА

1. J.Durnin. JOSA, A4, 651 (1987).
2. J.Durnin, J.J.Miceli Jr., and J.H.Eberly. Phys. Rev. Lett., 58, 1499 (1987).
3. J.Turunen, A.Vasara, and A.T.Friberg. Applied Optics, 27, 3959 (1988).

4. T.Wulle and S.Herminghaus. Phys. Rev. Lett., 70, 1401 (1993).
5. S.Klewitz, P.Leiderer, S.Herminghaus, and S.Sogomonian. Optics Letters, 21, 248 (1996).
6. I.Golub. Optics Letters, 20, 1847 (1995).
7. S.Klewitz, S.Herminghaus, S.Sogomonian, T.Jentsch, and M.Woerner. CLEO - 97, Baltimore, May 1997, Technical Digest, CTh 05, p.410.
8. S.Sogomonian, S.Klewitz, S.Herminghaus. Opt. Comm., 139, 313 (1997).
9. Н.Е.Андреев, Ю.А.Аристов, Л.Ю.Полонский, Л.Н.Пятницкий. ЖЭТФ, 73, 969 (1991).
10. Л.Ю.Марголин. Квантовая электроника, 23, 281 (1996).
11. J.V.Keller. J. Appl. Phys., 28, 426 (1957).
12. T.V.A.Senior and P.L.E.Uslengi. Proc. IEEE, 60, 1448 (1972).
13. А.В.Сивяевский. ПТЭ, 5, 216 (1993).
14. И.Р.Шен. Принципы нелинейной оптики. М., Наука, 1989.

## ԻՆՏԵՆՍԻՎ ԲԵՍՍԵԼՅԱՆ ՓՆՁԻ ՏԱՐԱԾՈՒՄԸ $\text{LiIO}_3$ ԲՅՈՒԲՆՈՒՄ

Կ. Զ. ԳՐԻԳՈՐՅԱՆ

Հայտնաբերված է  $\text{LiIO}_3$  բյուրեղում Բեսսելյան փնջի վերականգնման երևույթը, որի էությունը կայանում է նրանում, որ բյուրեղի մուտքում Բեսսելյան փունջ կազմող օղակի մի մասը փակելիս, ելքում դիտվում է ամբողջովին վերականգնված օղակ: Վերականգնման երևույթը բացատրվում է ինտենսիվ փնջի տարածման ընթացքում բյուրեղում առաջացած գծաձև վնասվածքի վրա փնջի դիֆրակցիայով: Բացատրությունը բերվում է դիֆրակցիայի երկրաչափական տեսության շրջանակներում:

## PROPAGATION OF INTENSE BESSEL BEAM IN A $\text{LiIO}_3$ CRYSTAL

K. Z. GRIGORIAN

The regeneration of Bessel beam in a  $\text{LiIO}_3$  crystal has been observed. The essence of this phenomenon is the following: if one blocks an azimuthal part of the Bessel beam ring, a full ring is reconstructed after the beam passes through the crystal. The regeneration phenomenon is interpreted as being due to the diffraction from a filament-shaped damage region, caused by the intense beam. The regeneration is given in terms of the geometrical theory of diffraction.

УДК 538.3

## ОСОБЕННОСТИ ЧЕРЕНКОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ВОЛНОВОДЕ С ДИСПЕРСНОЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ СРЕДОЙ

А. С. ВАРДАНЯН<sup>1</sup>, Э. Д. ГАЗАЗЯН<sup>2</sup>, А. Д. ТЕР-ПОГОСЯН<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ереванский государственный университет

<sup>2</sup>Ереванский физический институт

(Поступила в редакцию 15 июня 1998 г.)

Получены выражения для поля излучения периодической последовательности заряженных цилиндрических ступков в волноводе с дисперсной диэлектрической средой. Проанализирован спектр черенковских волн для выбранной модели диэлектрической проницаемости, исследованы фазовые и групповые скорости этих волн. Полученные результаты иллюстрированы на графиках для случая гауссовского распределения заряда вдоль длины ступка.

**1. Введение.** Проблеме черенковского излучения посвящено большое количество работ, обобщенных в нескольких обзорах. В частности, в наиболее позднем и полном обзоре Б.М.Болотовского [1] приведено выражение для тормозящей силы в случае точечного заряда, движущегося в волноводе как со сплошной дисперсной средой, так и с каналом, прорезанным внутри такой среды. К числу первых работ, в которых рассматривалось излучение Вавилова-Черенкова в волноводе, можно отнести работу [2], где методом собственных функций волновода решалась задача излучения последовательности линейных ступков. Этим же методом авторами настоящей работы рассматривалось излучение точечного заряда в волноводе с движущейся дисперсной средой [3] и было получено выражение для групповой скорости черенковской волны с учетом дисперсии. В перечисленных работах приводились выражения для тормозящей силы (потерь энергии) в виде бесконечной суммы по черенковским частотам, ибо только учет дисперсии мог бы ограничить спектр, что привело бы к суммированию конечного числа членов суммы.

Цель нашей работы – приблизиться к условиям реального физического эксперимента. Поэтому, во-первых, мы проводим обобщенное рассмотрение для случая, когда в волноводе движется последовательность цилиндрических ступков с однородным распределением заряда в поперечном сечении и с произвольной функцией распределения заряда (в частности, гауссовской) вдоль длины ступка. Нам представляется интересным исследовать не столько тормозящую силу, сколько продоль-

ную компоненту поля излучения для выяснения возможности использования этого поля в целях ускорения. Во-вторых, мы на примере конкретного закона дисперсии и, в частности, конкретного диэлектрика, определим число членов суммы ряда, приведем численные расчеты продольной компоненты поля излучения для параметров пучка стэнда Линус-20 ЕрФИ и, наконец, исследуем конечный спектр излучения и групповые скорости черенковских волн. Работа будет состоять из двух частей. В настоящей части мы рассмотрим сплошное заполнение волновода, в дальнейшем будет рассмотрено излучение в канале. Поскольку метод собственных функций для канала неприменим, мы будем решать непосредственно волновые уравнения с заданным распределением заряда.

**2. Черенковское излучение последовательности сгустков в волноводе с дисперсной средой.** Пусть периодическая последовательность  $N$  одинаковых цилиндрических сгустков радиусом  $r_0$  и зарядом  $q$  движется со скоростью  $v = \beta c$  по оси  $z$  круглого цилиндрического волновода, заполненного дисперсной средой. Расстояние между сгустками —  $d$ . Распределение заряда вдоль длины каждого из сгустков дается функцией  $f(\xi)$ , в поперечном сечении сгустки однородны. Запишем плотность заряда  $\rho$ :

$$\rho(r, z - vt) = \frac{q}{\pi r_0^2} \sigma(r) \frac{\sum_{k=1}^N \int f(\xi) \delta[z - vt - (k-1)d - \xi] d\xi}{\int f(\xi) d\xi} \quad (j_z = \rho v), \quad (1)$$

где

$$\sigma(r) = \begin{cases} 1, & r \leq r_0, \\ 0, & r > r_0; \end{cases} \quad (1a)$$

причем плотность заряда нормирована из условия  $\int \rho dv = Nq$ .

Для решения задачи достаточно определить скалярный потенциал  $\varphi$ , поскольку векторный потенциал  $A$  имеет только одну компоненту  $A_z$ , обусловленную током  $j_z = \rho v$  и связанную с  $\varphi$  калибровочным условием Лоренца  $\partial A_z / \partial z + (\epsilon \mu / c) \cdot (\partial \varphi / \partial t) = 0$ . В цилиндрической системе координат  $(r, \varphi, z)$  с осью  $z$ , направленной по оси волновода, волновое уравнение для скалярного потенциала имеет следующий вид:

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\epsilon \mu}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \varphi = -\frac{4\pi}{\epsilon} \rho. \quad (2)$$

Разложим скалярный потенциал  $\varphi$  и плотность заряда  $\rho$  в 4-кратный интеграл Фурье в цилиндрической системе координат:

$$\varphi, \rho = \int \varphi_{\omega k}, \rho_{\omega k} \exp\{-i[\omega t - k_z r \cos(\varphi - \varphi') - k_z z]\} k_r dk_r dk_z d\varphi' d\omega, \quad (3a)$$

$$\varphi_{\omega k}, \rho_{\omega k} = (2\pi)^{-4} \int \varphi, \rho \exp\{i[\omega t - k_z r \cos(\varphi - \varphi') - k_z z]\} r dr dz d\varphi dt, \quad (3b)$$

причем интегрирование по  $\omega, t, z$  и  $k_z$  ведется от  $-\infty$  до  $+\infty$ , по  $r$  и  $k_r$

от 0 до  $\infty$ , по  $\varphi$  и  $\varphi'$  от нуля до  $2\pi$ . Подставив (3а) в волновое уравнение (2), найдем связь между фурье-компонентами  $\rho_{\omega k}$  и  $\varphi_{\omega k}$ :

$$\varphi_{\omega k} = \frac{4\pi}{\varepsilon} \left( k_r^2 + k_z^2 - \varepsilon \mu \frac{\omega^2}{c^2} \right)^{-1} \rho_{\omega k}. \quad (4)$$

Величину  $\rho_{\omega k}$  найдем из обратного преобразования Фурье (3б), подставив туда выражение (1) для  $\rho$ :

$$\rho_{\omega k} = \frac{q}{\pi(2\pi)^2 v} \delta\left(\frac{\omega}{v} - k_z\right) \frac{J_1(k_r r_0)}{k_r r_0} \phi_{\text{посл}}\left(\frac{\omega}{v}\right). \quad (5)$$

В (5)  $J_1(k_r r_0)$  – функция Бесселя первого рода первого порядка, функция  $\phi_{\text{посл}}(\omega/v)$  отвечает за излучение  $N$  сгустков:

$$\phi_{\text{посл}}\left(\frac{\omega}{v}\right) = \phi\left(\frac{\omega}{v}\right) \sum_{k=1}^N \exp\left[-i\frac{\omega}{v}(k-1)d\right] = \phi\left(\frac{\omega}{v}\right) \exp\left[-i(N-1)\frac{\omega d}{2v}\right] \frac{\sin N\frac{\omega d}{2v}}{\sin\frac{\omega d}{2v}}, \quad (6)$$

а функция

$$\phi\left(\frac{\omega}{v}\right) = \left( \int f(\xi) d\xi \right)^{-1} \int f(\xi) \exp\left(-i\frac{\omega}{v}\xi\right) d\xi \quad (7)$$

отвечает за излучение одного сгустка.

Подставим (4) и (5) в (3а) и после интегрирования по  $\varphi$ ,  $k_z$  и  $k_r$  получим:

$$\varphi(r, z-vt) = \frac{q}{\pi v} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\varepsilon} \left[ K_0(kr) + \alpha I_0(kr) \right] \left[ \frac{2I_1(kr_0)}{kr_0} \phi_{\text{посл}}\left(\frac{\omega}{v}\right) \right] \exp\left[i\frac{\omega}{v}(z-vt)\right] d\omega, \quad (8)$$

где  $k^2 = \frac{\omega^2}{v^2}(1 - \varepsilon\mu\beta^2)$ , а  $I_0$ ,  $I_1$ ,  $K_0$  – модифицированные функции Бесселя и Ганкеля. Слагаемое  $\alpha I_0(kr)$  добавлено нами, чтобы удовлетворить граничному условию на стенке волновода  $r=a$ , состоящему в обращении в ноль продольной компоненты электрического поля

$$E_{z\omega} = -\frac{i\omega}{v}(1 - \varepsilon\mu\beta^2)\varphi_{\omega}, \quad (9)$$

откуда  $\alpha = -K_0(ka)/I_0(ka)$ .

При выполнении условия Черенкова  $\varepsilon\mu\beta^2 > 1$   $k$  становится мнимой величиной:  $k = -i\sqrt{\varepsilon\mu\beta^2 - 1} = -is$  (знак минус выбран по принципу излучения [1]), и подынтегральное выражение в (8) имеет полюсы на частотах

$$J_0(sa) = 0, \quad \frac{\omega_n}{v} \sqrt{\varepsilon\mu\beta^2 - 1} a = \mu_{0n}, \quad (10)$$

где  $\mu_{0n}$  – корни функции Бесселя нулевого порядка  $J_0(\mu_{0n}) = 0$ . В поле излучения дает вклад лишь второе слагаемое, тогда как первое обуслов-

лено поляризационными потерями [1,4]. Продольную компоненту поля излучения запишем из (8) и (9):

$$E_z(r, z - vt) = \frac{q}{c^2} \operatorname{Re} \int_{-\infty}^{\infty} \mu \left( 1 - \frac{1}{\varepsilon \mu \beta^2} \right) \frac{N_0(sa)}{J(sa)} J_0(sr) \frac{J_1(sr_0)}{sr_0} \phi_{\text{посл}} \left( \frac{\omega}{v} \right) e^{i \frac{\omega}{v} (z - vt)} i \omega d\omega. \quad (11)$$

Интегрирование в (11) производится в комплексной плоскости  $\omega$  введением малой мнимой части диэлектрической проницаемости, положительной для частот  $\omega_n > 0$ , и отрицательной для  $\omega_n < 0$  (у нас временная зависимость  $e^{-i\omega t}$ ). Парные полюсы  $\omega_n = \pm \mu_{0n} / v \sqrt{\varepsilon \mu \beta^2 - 1}$  смещаются вниз от действительной оси, и мы берем замкнутый контур интегрирования, включающий действительную ось и нижнюю полуокружность с обходом полюсов сверху. Согласно лемме Жордана, интеграл по полуокружности обращается в ноль при  $z < vt$ . При  $z > vt$  контур интегрирования замыкается в верхней полуокружности и интеграл равняется нулю, т.е. поле впереди заряда отсутствует. Позади же заряда ( $z < vt$ ) поле равно

$$E_z = -\frac{2q}{a^2} \sum_n \frac{J_0\left(\mu_{0n} \frac{r}{a}\right)}{J_1^2(\mu_{0n})} \frac{\sqrt{\varepsilon \mu \beta^2 - 1}}{\varepsilon \frac{d}{d\omega} (\omega \sqrt{\varepsilon \mu \beta^2 - 1})} \frac{2J_1\left(\mu_{0n} \frac{r}{a}\right)}{\mu_{0n} \frac{r}{a}} F_{\text{посл}} \left( \frac{\omega_n}{v} \right). \quad (12)$$

Здесь суммирование ведется по положительным частотам  $\omega_n$ , удовлетворяющим дисперсионному уравнению (10),  $\varepsilon$  и  $\mu$  являются функциями этих частот, а

$$F_{\text{посл}} \left( \frac{\omega_n}{v} \right) = \left( \int f(\xi) d\xi \right)^{-1} \sum_{k=1}^N \int f(\xi) \cos \frac{\omega_n}{v} [z - vt - \xi - (k-1)d] d\xi. \quad (13)$$

Для сгустков с гауссовским распределением ( $f(\xi) = (\pi \xi^2)^{-1/2} \times \exp(-\xi^2 / \xi^2)$ ),

$$F_{\text{посл}} \left( \frac{\omega_n}{v} \right) = \exp \left( -\frac{\omega_n^2}{4v^2} \xi^2 \right) \frac{\sin N \frac{\omega_n d}{2v}}{\sin \frac{\omega_n d}{2v}} \cos \frac{\omega_n}{v} \left[ z - vt - (N-1) \frac{d}{2} \right]. \quad (13a)$$

При  $N=1$  приходим к случаю одного сгустка.

**3. Анализ спектра черенковского излучения в волноводе и выбор модели диэлектрической проницаемости среды.** Если в свободном пространстве черенковское излучение представляет собой цилиндрические волны, исходящие от траектории сгустка (заряда), то в волноводе эти волны, отражаясь от идеально проводящих стенок, формируют волновые пакеты, состоящие из собственных мод волновода, возбужденных на частотах [2]

$$\omega_n = \frac{\kappa_n v}{\sqrt{\varepsilon \mu \beta^2 - 1}} \quad (\varepsilon \mu \beta^2 > 1), \quad (14)$$

где  $\kappa_n$  – собственные значения поперечного сечения волновода (для круглого волновода  $\kappa_n = \mu_{0n}/a$ ). Условие возникновения черенковского излучения в волноводе при этом сводится к условию

$$\omega_n = \kappa_n v, \quad (15)$$

где  $k_{zn} = \sqrt{\epsilon\mu\omega^2/c^2 - \kappa_n^2}$  – постоянная распространения волны в волноводе, а само условие (15) является аналогом известной формулы черенковского излучения в свободном пространстве:  $\cos\theta = 1/\beta n$ . Отсюда же волноводная длина волны черенковских волн равняется  $\lambda_{волн} = 2\pi/k_{zn} = 2\pi v/\omega_n$ . В отсутствие дисперсии для фазовой  $v_{фн} = \omega/k_{zn}$  и групповой  $v_{гн} = d\omega/dk_{zn}$  скоростей получаются соотношения [5]

$$v_{фн} = v, \quad v_{гн} = v/\epsilon\mu\beta^2 \quad (v_{гн} v_{фн} = c^2/\epsilon\mu), \quad (16)$$

т.е. все черенковские моды распространяются с одинаковыми фазовыми и групповыми скоростями и излучаются под одним и тем же углом к оси волновода. В результате этого они формируют волновые пакеты, движущиеся за излучающим сгустком (зарядом) со скоростью  $v_{гн} < v$ . Между тем, наличие дисперсии приводит к нарушению этой картины. Как было показано в [3], хотя фазовая скорость черенковских волн, как и прежде, остается равной скорости сгустка, групповая скорость черенковских волн оказывается зависящей от дисперсии среды и описывается выражением

$$v_{гн} = \frac{v}{\beta^2 \epsilon\mu} \left[ 1 + \frac{\omega_n}{2\epsilon\mu} \frac{d(\epsilon\mu)}{d\omega_n} \right]^{-1}. \quad (17)$$

В качестве модели дисперсионной среды, наиболее приближенной к действительности, рассмотрим экстраполяционную модель

$$\epsilon = 1 + \frac{\epsilon_0 - 1}{1 + (\omega\tau)^2} \quad (\mu = 1), \quad (18)$$

где  $\epsilon_0$  – статическое значение  $\epsilon$  (при  $\omega\tau \ll 1$ ),  $\tau$  – время релаксации среды, значение которого для большинства диэлектриков лежит в пределах  $10^{-12} \div 10^{-14}$  сек. Если выбрать, например,  $\tau = 7,22 \cdot 10^{-13}$  сек, то (18) хорошо аппроксимирует зависимость  $\epsilon(\omega)$  для тефлона (фторопласта), для которого получается отличное согласие с измеренными [6] данными (см. табл.):

Таблица

f(ГГц)	$\epsilon_{изм.}$	$\epsilon_{расчет.}$
$3 \cdot 10^2$	2.1	2.10
$3 \cdot 10^6$	2.1	2.10
$3 \cdot 10^9$	2.1	2.10
$3 \cdot 10^{10}$	2.08	2.08
$3 \cdot 10^{11}$	–	1.40
$3 \cdot 10^{12}$	–	1.29

Из (14) и (18) приходим к биквадратному уравнению для определения черенковских частот  $\omega_n$ . Из четырех его корней выбираем тот единственный, который при  $\tau \rightarrow 0$  переходит в (14):

$$\omega_{\text{черп}} = \left\{ \frac{\varepsilon_0 \beta^2 - 1 - (v \kappa_n \tau)^2 - \sqrt{(\varepsilon_0 \beta^2 - 1 - (v \kappa_n \tau)^2)^2 - 4(1 - \beta^2)(v \kappa_n \tau)^2}}{2(1 - \beta^2)\tau^2} \right\}^{1/2}, \quad (19)$$

а условие действительности частоты приводит к требованию

$$\varepsilon_0 \beta^2 - 1 > (v \kappa_n \tau)^2 + 2\sqrt{1 - \beta^2} |v \kappa_n \tau|. \quad (20)$$

Условие (20) приводит к ограничению числа мод черенковских волн в волноводе:

$$\kappa_n < \frac{1}{c\tau} \left( \sqrt{\varepsilon_0 - 1} - \sqrt{\frac{1}{\beta^2} - 1} \right) \equiv \kappa_{\text{max}}. \quad (20a)$$

Отсюда следует, что спектр черенковского излучения оказывается ограниченным сверху частотой

$$\omega_{\text{max}} = \frac{1}{\tau} \left( \beta \frac{\sqrt{\varepsilon_0 - 1}}{\sqrt{1 - \beta^2}} - 1 \right)^{1/2} \approx \frac{\gamma^{1/2} (\varepsilon_0 - 1)^{1/4}}{\tau}. \quad (21)$$

Таким образом, максимальная частота спектра черенковского излучения зависит от энергии частицы ( $\gamma$  - лоренц-фактор) и от параметра среды  $\tau$ , но, как и следовало ожидать, не зависит от параметров волновода.

Следует также отметить, что для выбранной модели  $d\varepsilon/d\omega < 0$ , и групповые скорости черенковских волн оказываются большими, чем в бездисперсной среде с  $\varepsilon = \varepsilon_0$ , оставаясь при этом меньше скорости излучающего заряда. С приближением  $v_{\text{гр}}$  к скорости заряда черенковское излучение прекращается.

Поле черенковского излучения, создаваемое периодической последовательностью сгустков (см. (12) и (13a)), характеризуется множителем  $\sin N(\omega_n d / 2\nu) / \sin(\omega_n d / 2\nu)$ . Если предположить, что некоторая  $i$ -ая мода, удовлетворяет условию

$$\frac{\omega_{im}}{2\nu} d = \pi m, \quad (22)$$

где  $m$  - целое число, то напряженность поля будет усилена в  $N$  раз, тогда как остальные моды, подвергаясь деструктивной интерференции, не дадут сколько-нибудь заметного вклада в поле излучения. Интенсивность при этом возрастает в  $N^2$  раза. Этого эффекта при заданных характеристиках пучка можно добиться выбором соответствующего размера волновода из условия (22) с учетом (10) и (18). Таким образом, напряженность (интенсивность) поля излучения периодической последовательности сгустков определится уже не количеством суммируемых мод, но числом когерентно излучающих сгустков, поля излучения которых эффективно суммируются на одной выбранной моде [2].

4. Результаты численного анализа. Как было указано выше, выбранная модель, хорошо описывая реальную картину поля, например, для тефлона, наглядно иллюстрирует влияние дисперсии среды на формирование полей черенковского излучения в волноводе. Расчеты продольной компоненты черенковского поля проводились по формулам (12) и (13а) для случая одного сгустка. В расчетах использовались параметры пучка стенда Линус-20 ЕрФИ:  $\gamma=10$  ( $\beta=0,995$ ), число электронов в сгустке  $3 \cdot 10^9$  с гауссовским распределением заряда вдоль длины сгустка ( $\sqrt{\xi^2}=0,5$  см), радиус сгустков  $r_0=0,5$  см, радиус волновода  $a=3,685$  см. На рис.1 приведена продольная компонента поля излучения  $E_z$  от одного сгустка для среды без дисперсии с  $\epsilon=2,1$ , на рис.2 – для тефлона с  $\epsilon_0=2,1$  и  $\tau=7,22 \cdot 10^{-13}$  с (стрелки на рисунках указывают направление движения сгустка и распространения черенковских волн). Число излученных мод, согласно (20а), равно 51, поэтому для недисперсной среды мы ограничились тем же числом мод. Первая мода излучается на частоте  $\nu_1 = \omega_1 / 2\pi = 1,8 \cdot 10^{10}$  Гц, последняя – на частоте  $\nu_{\max} = \omega_{\max} / 2\pi = 5 \cdot 10^{11}$  Гц. При этом в формировании поля излучения эффективно участвуют лишь первые несколько мод, для которых изменение групповой скорости незначительно.

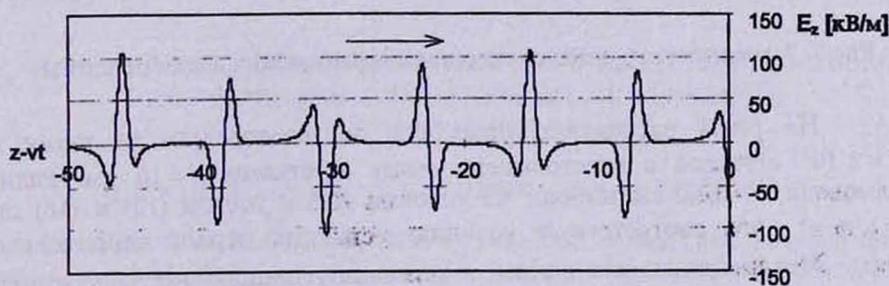


Рис.1.  $E_z$ -компонента поля излучения одиночного сгустка в зависимости от  $z-vt$  в среде без дисперсии.

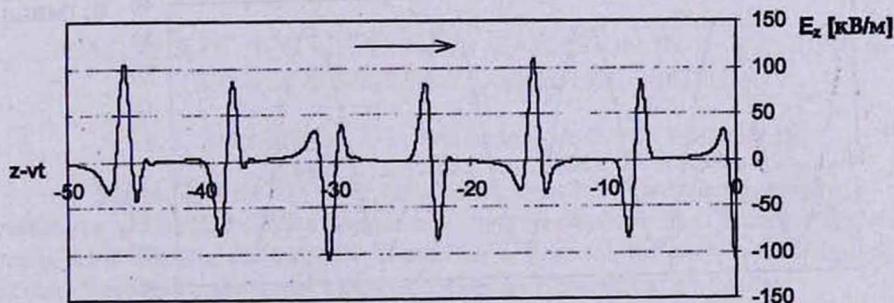


Рис.2.  $E_z$ -компонента поля излучения одиночного сгустка в зависимости от  $z-vt$  в дисперсной среде ( $\tau=7,22 \cdot 10^{-13}$  с).

Сравнение рис.1 и 2 показывает небольшое смещение пакета волн в случае дисперсной среды в сторону движения ступка, происходящее вследствие увеличения групповой скорости, а также незначительное уменьшение амплитуды.

Рис.3. показывает медленный рост отношения  $v_{гр}/c$  (в зависимости от частоты), вычисленного по формуле (17). Как видим, групповая скорость на максимальной частоте остается меньше скорости движения ступка:  $v_{гр} < v = 0,995c$ . Здесь приведена также постоянная групповая скорость черенковских волн в среде с  $\epsilon = 2,1$  в отсутствие дисперсии ( $v_{гр}/c = 1/\beta\epsilon = 0,4786$ ).

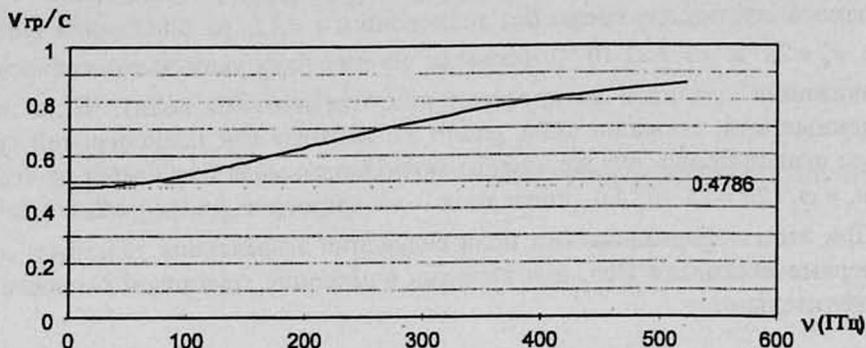


Рис.3. Зависимость групповых скоростей черенковских волн от частоты.

На рис.4 рассчитано поле для последовательности таких же  $N = 3 \cdot 10^3$  ступков с расстоянием между ступками  $d = 10$  см. Радиус волновода  $a = 3,685$  см выбран из условия (22) с учетом (10) и (18) при  $i = 1, m = 1$ , что соответствует условию усиления первой черенковской моды. Это приводит, как видим, к квазисинусоидальному колебанию с увеличением амплитуды в  $N$  раз и волноводной длиной волны  $\lambda_{волн} = d = 10$  см. Суммарный вклад остальных мод здесь ничтожно мал.

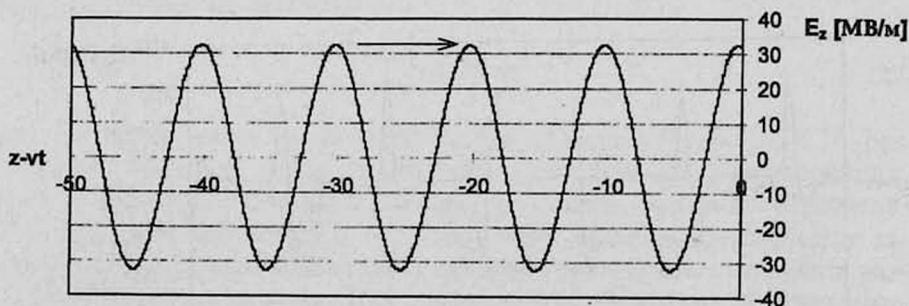


Рис.4.  $E_z$ -компонента поля излучения последовательности ступков.

5. **Заключение.** Учет дисперсии позволяет строить физически обоснованную картину поля. Для сред со слабой дисперсной зависимостью (каковой является, например, тефлон) роль дисперсии сводится, в основном, к ограничению спектра (числа мод в волноводе) сверху, что позволяет строго оценить ожидаемые напряженности черенковских полей. С другой стороны, в случае периодической последовательности излучающих сгустков путем подбора радиуса волновода можно добиться эффективного усиления одной выбранной моды и полностью отвлечься от влияния дисперсии.

Работа выполнена при поддержке гранта МНТЦ А-087.

## Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Б.М.Болотовский. УФН, 75, вып.2, 295 (1961).
2. Э.Д.Газазян, Э.М.Лазиев. О черенковском излучении в волноводе. Изв. АН Арм. ССР, физ.-мат. науки, 16, 79 (1963).
3. Э.Д.Газазян, Э.М.Лазиев, А.Д.Тер-Погосян. Поле заряженной частицы и излучение Вавилова-Черенкова в волноводе с бесконечной движущейся средой. Препринт ЕрФИ, ЕФИ-412(19)-80, Ереван, 1980, 16 с.
4. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Электродинамика сплошных сред. М., Наука, 1982.
5. E.A.Begloyan, E.D.Gazazian, V.G.Kocharian, E.M.Laziev. The Interaction of the Charged Particles Bunches and Waveguide-Cavity Structures. Linac-17, Tsukuba (Japan), 1, 230 (1994).
6. Дж.К.Саусворт. Принципы и применения волноводной передачи. М., Сов. Радио, 1955.

## ՉԵՐԵՆԿՈՎՅԱՆ ՃԱՌԱԳԱՅԹՄԱՆ ԱՌԱՆՁՆԱՀԱՏՎՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԸ ԴԻՍՊԵՐՍՍԻՆ ԴԻԷԼԵԿՏՐՈՎԱՆ ՄԻՋԱՎԱՅՐՈՎ ԼՅՎԱԾ ԱԼԻՔՍԱՐՈՒՄ

Ա. Ս. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ, Է. Դ. ԳԱԶԱԶՅԱՆ, Ա. Դ. ՏԵՐ-ՊՈԴՈՍՅԱՆ

Ստացված են արտահայտություններ լիցքավորված գլանաձև թանձրուկների պարբերական հաջորդականության ճառագայթման դաշտերի համար՝ դիսպերսային դիէլեկտրական միջավայրով լցված ալիքատարում: Քննարկված են Չերենկովյան ալիքների սպեկտրը դիէլեկտրական բախանցելիության ընտրված մոդելի դեպքում, ինչպես նաև այդ ալիքների փուլային և ալիքային արագությունները: Լիցքի գառայան բաշխում ունեցող թանձրուկների համար ստացված արդյունքները ցուցադրված են գրաֆիկների վրա:

## FEATURES OF THE CHERENKOV RADIATION IN A WAVEGUIDE WITH A DISPERSIVE DIELECTRIC MEDIUM

A. S. VARDANIAN, E. D. GAZAZIAN, A. D. TER-POGOSSIAN

Expressions for the field of charged cylindrical bunches periodical sequence radiation in a waveguide with a dispersive medium are obtained. The Cherenkov spectrum for the selected model of the dielectric permittivity is analyzed, the phase- and group velocities of these waves are investigated. Obtained results are illustrated in the graphs.

УДК 535.341

## К ТЕОРИИ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПЕРЕХОДА В КРИСТАЛЛЕ $\text{LiNbO}_3$

Ф. П. САФАРЯН

Армянский государственный педагогический институт

(Поступила в редакцию 22 сентября 1997г.)

Рассмотрена простая модель сегнетоэлектрического перехода в кристалле  $\text{LiNbO}_3$ . Предполагается, что в качестве "мягкой" колебательной моды при сегнетоэлектрическом переходе выступает одна из двух оптических ветвей колебаний кристаллических плоскостей ионов  $\text{Li}^{1+}$ ,  $\text{Nb}^{5+}$  и  $\text{O}^{2-}$  в направлении полярной оси кристалла. Получены формулы, позволяющие вычислить частоту "мягкой" моды и определить координаты ионов в элементарной ячейке кристалла в сегнетоэлектрической и параэлектрической фазах.

### 1. Введение

Кристалл  $\text{LiNbO}_3$  (ниобат лития, НЛ), который в последнее время нашел широкое применение в нелинейно-оптических, квантово-оптических и т.п. приборах, представляет интерес с точки зрения происходящего в нем сегнетоэлектрического фазового перехода, когда ниже определенной температуры (температура Кюри) параэлектрическая неполярная фаза превращается в полярную (имеющую довольно большую спонтанную поляризацию) фазу. НЛ является в экспериментальном отношении одним из хорошо изученных материалов (точно известна температура перехода, хорошо изучена кристаллическая структура в сегнетоэлектрической фазе, измерена частота мягкой моды при низких температурах и т. д.) [1,2]. Это позволило на НЛ довольно успешно применять существующие в настоящее время разные теоретические построения (как феноменологического, так и микроскопического характера) для объяснения природы сегнетоэлектрических переходов, происходящих в кристаллических твердых веществах [1,3,4]. В этом отношении особенно плодотворным оказалось предложенное Кокреном, Гинзбургом и Андерсоном предположение об определяющей роли "мягких" конденсирующихся мод нормальных колебаний кристаллической решетки в сегнетоэлектрических фазовых переходах. Эта идея затем нашла свое отражение как в термодинамической теории фазового перехода, так и в модельных теориях, таких, например, как теория молекулярного поля, которые качественно неплохо объясняют многие черты фазового перехода в НЛ. Мы также исходили из общей концепции о существовании "мягкой" моды (ММ), однако поставили перед собой цель на основе

учета реальных взаимодействий в кристалле количественно вычислить частоту ММ и связанные с ней другие характеристики сегнетоэлектрического перехода в НЛ. Основное предположение, на котором основаны наши вычисления, является то, что в качестве единственной "мягкой" моды в кристалле НЛ выступает одна из двух оптических ветвей колебаний системы кристаллических плоскостей ионов  $\text{Li}^{1+}$ ,  $\text{Nb}^{5+}$  и  $\text{O}^{2-}$ , которые расположены в перпендикулярном к тригональной оси  $c$  кристалла направлении и колеблются в этом направлении. Такое предположение основано на хорошо известном экспериментальном факте о том, что спонтанная поляризация в НЛ возникает в направлении оси  $c$  и является следствием смещения положительной и отрицательной подрешеток кристалла друг относительно друга. Для решения динамической задачи колебаний кристаллических плоскостей необходимо предварительно найти ту часть потенциальной энергии взаимодействия заряженных плоскостей, которая способна вызывать возвращающую силу при их относительном движении. Эту задачу мы решили приближенно в рамках теории электростатического взаимодействия заряженных плоскостей, считая при этом, что заряды на них расположены однородно и непрерывно. В результате для фундаментальных частот колебаний плоскостей получены формулы, зависящие от координат ионов, от величин их зарядов и масс. При этом оказалось, что частота одного из этих колебаний при определенном условии, связывающем друг с другом координаты и заряды ионов, обращается в нуль (ММ). Соответствующая этому условию довольно простая формула позволяет найти те расположения ионов в элементарной ячейке, при которых кристалл может находиться в устойчивых (когда частота ММ приобретает действительные значения) или в неустойчивых (частота ММ получается мнимой) фазах. Она позволяет также следить за ходом фазового превращения, поскольку связывает друг с другом координаты ионов в двух рассмотренных фазах. Так, например, показано, что ионы  $\text{Li}$  и  $\text{Nb}$ , которые в сегнетоэлектрической фазе занимают несимметричные положения внутри своих окружающих октаэдров, при фазовом переходе смещаются в направлении оси  $c$  и в параэлектрической фазе занимают такие центросимметричные положения, когда ионы  $\text{Nb}^{5+}$  располагаются в середине двух кислородных плоскостей, а ионы  $\text{Li}$  располагаются не на самой кислородной плоскости, как иногда считается, а с равной вероятностью занимают равноудаленные от кислородной плоскости положения по обе ее стороны.

Таким образом, приведенные здесь вычисления подтверждают, что сегнетоэлектрический переход в кристалле НЛ имеет характер не чистого перехода типа "смещения", как считают многие авторы (см., например, [5-11]), и не чистого перехода типа "порядок-беспорядок" (см. [12-15]), а скорее всего является переходом смешанного типа: относительно ионов  $\text{Nb}^{5+}$  он является переходом типа "смещение", а относительно ионов  $\text{Li}^{1+}$  — переходом типа "порядок-беспорядок". Версия перехода смешанного типа подтверждается, например, в работах [16-18]. Отметим также, что в недавно опубликованной работе [19] считается, что переход в НЛ является переходом типа "порядок-беспорядок", но он осуществляется не за счет перескоков ионов  $\text{Li}^{1+}$  между двумя потенциальными ямами (как ранее считалось), а за счет перескоков ионов  $\text{Nb}^{5+}$ .

## 2. Кристаллические плоскости в НЛ и взаимодействие между ними

Проекция элементарной ячейки кристалла  $\text{LiNbO}_3$  (в ней имеется 6 формульных единиц) на плоскость, где лежит полярная ось  $c$ , приведена на рис.1. Видно, что между двумя кислородными плоскостями, находящимися на расстоянии  $a = 2,31\text{Å}$  друг от друга, расположены две плоскости —  $\text{Li}^{1+}$  и  $\text{Nb}^{5+}$ . Расстояния между ближайшими плоскостями (при  $T \approx 0\text{ K}$ ) равны:  $R_{\text{Li-O}} = R_{20} = 0,69\text{Å}$ ,  $R_{\text{Li-Nb}} = R_{21} = 0,737\text{Å}$ ,  $R_{\text{Nb-O}} = R_{10} = 0,883\text{Å}$ .<sup>1)</sup> Ионы  $\text{Li}$  и  $\text{Nb}$  окружены искаженными октаэдрами, основания которых (равносторонние треугольники разной величины) находятся на кислородных плоскостях. Ионы  $\text{Li}$  и  $\text{Nb}$  смещены из centrosимметричных положений в своих октаэдрах в разные стороны по оси  $c$  на величины  $0,465$  и  $0,272\text{Å}$  соответственно. На плоскостях  $\text{Li}$  и  $\text{Nb}$  ионы расположены по узлам ромбической сети. Расстояние между ионами (сторона ромба) равна постоянной решетки  $b$  ( $b = 5,148\text{Å}$ ) в перпендикулярном к оси  $c$  направлению. Расположение ионов в направлении  $c$  также приведено на рис.1. Видно, что по направлению оси  $c$  ионы (со своими октаэдрическими окружениями) чередуются в следующей последовательности:  $\text{Li}$ ,  $\text{Nb}$ , вакансия,  $\text{Li}$ ,  $\text{Nb}$ , вакансия и т.д. Ближайшее расстояние между ионами  $\text{Li}$  и  $\text{Nb}$  в вертикальном направлении составляет  $3,047\text{Å}$ , в то время как расстояние между  $\text{Li}$ -евыми и  $\text{Nb}$ -евыми плоскостями составляет всего  $0,737\text{Å}$ . Это означает, что ионы  $\text{Li}$  и  $\text{Nb}$  в ближайших плоскостях смещены друг относительно друга.

Мы исходили из предположения о том, что причиной сегнетоэлектрического перехода является замораживание некоторых оптических ветвей колебаний решетки, однако в случае НЛ мы считаем, что в роли ММ выступает одна из двух оптических ветвей колебаний системы кристаллических плоскостей (перпендикулярные к оси  $c$  плоскости, на которых расположены ионы  $\text{Li}^{1+}$ ,  $\text{Nb}^{5+}$  и  $\text{O}^{2-}$ ) по направлению тригональной оси  $c$ . Для составления уравнений движения этих плоскостей необходимо предварительно найти энергию их взаимодействия. Электростатическая часть этой энергии, вычисленная для бесконечно больших плоскостей ( $R/l = 0$ , где  $l$  — геометрический размер плоскостей,  $R$  — расстояние между ними), хорошо известна: она равна  $W = 2\pi\sigma_1\sigma_2 Rl^2$  ( $\sigma$  — поверхностная плотность зарядов). Однако это решение нам не подходит, поскольку при смещении плоскостей из равновесных положений оно не вызывает возвращающую силу, заставляющую плоскости колебаться. Одно пригодное нам частное решение этой задачи в виде логарифмической функции ( $\ln l/R$ ), когда учитываются так называемые “краевые” эффекты ( $R/l \neq 0$ ), имеется, например, в [9]. Здесь мы приводим более простой способ нахождения нужного нам члена в энергии взаимодействия плоскостей: сначала находим его для взаимодействующих линий (задача точно решается), а затем полученный результат обобщаем для случая взаимодействующих плоскостей.

<sup>1)</sup> Эти расстояния получены на основе структурных данных, приведенных в [6] для стехиометрического состава кристалла НЛ.

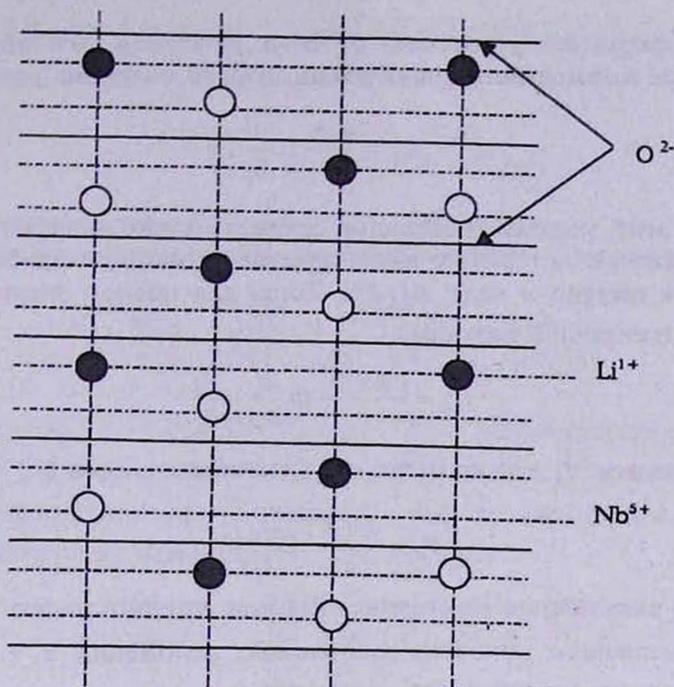


Рис.1. Расположение кристаллических плоскостей в элементарной ячейке кристалла НЛ.

Итак, энергия электростатического взаимодействия двух заряженных длинных линий, очевидно, равна

$$W_y = \frac{1}{2} e^2 \tau_i \tau_j \int_0^l dx_1 \int_0^l dx_2 \frac{1}{\sqrt{R_y^2 + (x_2 - x_1)^2}}, \quad (1)$$

где  $x_1, x_2$  – координаты ионов на линии,  $l$  – длина линий,  $R_y$  – расстояние между ними,  $\tau_i = N_i q_i / l$  ( $q_i$  – заряд расположенных на линии ионов,  $N_i$  – их число). Вычисление интеграла (1) дает:

$$W_y = e^2 \tau_i \tau_j \left[ \frac{l}{2} \ln \frac{l + \sqrt{R_y^2 + l^2}}{-l + \sqrt{R_y^2 + l^2}} - \sqrt{l^2 - R_y^2} + R_y \right]. \quad (2)$$

В формуле (2) оставим только логарифмический член и применим ее для взаимодействующих плоскостей, считая при этом, что на каждой плоскости имеются  $N = 1/b$  линий. Тогда энергию взаимодействия таких плоскостей можно представить в виде

$$W_y = e^2 \sigma_i \sigma_j b^2 \ln \frac{2l}{R_y}, \quad (3)$$

где  $\sigma_i = N_i q_i / lb$  – поверхностная плотность зарядов.

В формуле (3) переходя от  $\sigma$  к зарядам  $q$ , для отнесенной к одной паре взаимодействующих ионов энергии получим:

$$U_y = \frac{q_i q_j}{b} \ln \frac{2l}{R_y}. \quad (4)$$

К этой энергии необходимо добавить также энергию отталкивания плоскостей, которая не имеет электростатическую природу и представляется обычно в виде  $B_y / R_y^n$ . Тогда для полной энергии взаимодействия плоскостей получим:

$$U_y = \frac{-q_i q_j e^2}{b} \ln \frac{2l}{R_y} + \frac{B_y}{R_y^n}. \quad (5)$$

Коэффициенты  $B_y$  можно найти из условия равновесия ( $U'_y = 0$ ):

$$B_y = \frac{q_i q_j e^2}{bn} (R_y^{(0)})^n, \quad (6)$$

где  $R_y^{(0)}$  – равновесное расстояние. Разлагая потенциальную функцию в ряд по смещениям ионов из равновесных положений  $x_y = R_y - R_y^{(0)}$  до второго порядка включительно, получим:

$$U_y = \frac{q_i q_j e^2}{b} \left( \frac{1}{n} - \ln \frac{2l}{R_y^{(0)}} \right) + \frac{q_i q_j e^2 n}{b(R_y^{(0)})^2} \cdot \frac{x_y^2}{2}. \quad (7)$$

Возвращающую силу найдем, дифференцируя (7) по  $x_y$ . Она зависит от смещения  $x_y$  по закону Гука, коэффициент жесткости для которого равен

$$C_y = \frac{q_i q_j e^2}{b(R_y^{(0)})^2} n. \quad (8)$$

Полученная формула (8) справедлива для взаимодействующих плоскостей Li и O (а также для Nb и O), так как при движении этих плоскостей навстречу друг другу ионы Li (Nb) соприкасаются с кислородными треугольниками, между которыми возникает сила отталкивания. Но при относительном движении плоскостей Li и Nb между ними нет точки соприкосновения и на первый взгляд кажется, что между одноименно заряженными плоскостями Li и Nb не действуют компенсирующие короткодействующие силы неэлектростатического характера. Однако нетрудно заметить, что в роли таких сил (но притягательного характера) могут выступать короткодействующие силы отталкивания, возникающие в соседних к ионам Li и Nb связях Li-O и Nb-O. Так что в этом случае для энергии взаимодействующих плоскостей можно написать:

$$U_y = \frac{q_i q_j e^2}{b} \ln \frac{2l}{R_y} - \left( \frac{B_{i0}}{R_{i0}^n} + \frac{B_{j0}}{R_{j0}^n} \right). \quad (9)$$

Учитывая, что соседним связям передается одна и та же сила взаимо-

действия  $F_y = e^2 q_i q_j / bR_y$ , из условий равновесия, возникающих в этих связях, можно найти величины постоянных  $B$ :

$$\frac{q_i q_j e^2}{bR_y^{(0)}} = \frac{B_{i0} n}{(R_{i0})^{n+1}} = \frac{B_{j0} n}{(R_{j0})^{n+1}}. \quad (10)$$

Подставляя эти значения в (9) и разлагая полученное уравнение по смещениям ионов из равновесных положений, получим:

$$U_y = \frac{q_i q_j e^2}{2b} \left\{ \frac{x_y^2}{(R_y^{(0)})^2} - \frac{n+1}{R_y^{(0)}} \left( \frac{x_{i0}^2}{(R_{i0}^{(0)})} + \frac{x_{j0}^2}{(R_{j0}^{(0)})} \right) \right\}, \quad (11)$$

где  $x_y = R_y - R_y^{(0)}$ ,  $x_{i0} = R_{i0} - R_{i0}^{(0)}$ ,  $x_{j0} = R_{j0} - R_{j0}^{(0)}$ . Дифференцируя (11) по смещениям  $x_y$  и учитывая, что  $x_y = x_{i0} = x_{j0}$ , а также тот факт, что для упругих деформаций  $x_{i0}/R_{i0}^{(0)} = x_{j0}/R_{j0}^{(0)}$ , для коэффициента жесткости взаимодействующих плоскостей Li и Nb получим:

$$C_y = \frac{q_i q_j}{b(R_y^{(0)})^2} \left[ 1 - \frac{2(n+1)R_y^{(0)}}{R_{i0}^{(0)} + R_{j0}^{(0)}} \right] \approx - \frac{2q_i q_j e^2 n}{bR_y^{(0)}(R_{i0}^{(0)} + R_{j0}^{(0)})}. \quad (12)$$

Для нашего случая взаимодействующих плоскостей в НЛ на основе формул (8) и (12) окончательно имеем:

$$C_{Li-0} = C_{20} = \frac{-3q_0 q_2 e^2}{bR_{20}^2} n, \quad C_{Nb-0} = C_{10} = \frac{-3q_0 q_1 e^2}{bR_{10}^2} n, \quad (13)$$

$$C_{Li-Nb} = C_{21} = \frac{2q_2 q_1 e^2}{bR_{21}(R_{20} + R_{10})} n.$$

Считается, что треугольники кислорода с зарядами  $3q_0$  и массами  $M_0 = 3m_0$  ( $q_0$  и  $m_0$  - заряд и масса одного кислородного иона) двигаются как целое.

### 3. Колебания плоскостей и мягкая мода

Имея в распоряжении отнесенную на один ион энергию взаимодействия плоскостей (5), динамическую задачу колебания систем заряженных плоскостей мы фактически сводим к задаче о колебаниях линейной решетки, в элементарной ячейке которой (с параметром  $a$ ) имеются три частицы  $Li^{1+}$ ,  $Nb^{5+}$  и  $3O^{2-}$ . Обозначим в  $s$ -ой элементарной ячейке смещения этих частиц Nb, Li и 3O соответственно через  $u_s$ ,  $v_s$ ,  $\xi_s$  (см. рис.2). В качестве уравнений движения (с учетом только взаимодействия между ближайшими соседями) получим следующую систему дифференциальных уравнений:

$$M_1 \ddot{u}_s = C_{10}(\xi_{s+1} - u_s) + C_{21}(v_s - u_s),$$

$$M_0 \ddot{\xi}_s = C_{20}(v_s - \xi_s) + C_{10}(v_{s-1} - \xi_s), \quad (14)$$

$$M_2 \ddot{v}_s = C_{21}(u_s - v_s) + C_{20}(\xi_s - v_s),$$

где коэффициенты  $C$  определяются выражениями (13).  $M_1, M_2, M_0$  – массы ионов Nb, Li и  $3O$  соответственно. Решения системы уравнений (14) ищем в виде бегущих волн, распространяющихся в цепочке по направлению  $s$ :  $u_s = ue^{iak}e^{iakt}$  (и два аналогичных выражения для смещений  $v_s$  и  $\xi_s$ ). Подставляя эти выражения в систему (14), для амплитуд  $u, v, \xi$  получим систему алгебраических линейных однородных уравнений

$$\begin{aligned} -M_1\omega^2 u &= C_{10}(\xi e^{iak} - u) + C_{21}(v - u), \\ -M_2\omega^2 v &= C_{21}(u - v) + C_{20}(\xi - v), \\ -M_0\omega^2 \xi &= C_{20}(v - \xi) + C_{10}(ue^{-iak} - \xi), \end{aligned} \quad (15)$$

которая имеет нетривиальное решение, когда ее детерминант обращается в нуль. Нетрудно заметить, что в нашем случае это детерминантное уравнение, решение которого позволяет найти частоты трех колебаний (одно акустическое и два оптических), является кубическим относительно  $\omega^2$ . Однако поскольку в качестве ММ могут выступать только оптические колебания, то можно в уравнениях (14) предварительно подставить  $k = 0$ . Тогда частота акустического колебания автоматически обращается в нуль, и кубическое уравнение превращается в квадратное, которое позволяет найти две фундаментальные частоты оптических ветвей. В результате для детерминантного уравнения системы (15) получим

$$\omega^4 - B\omega^2 + D = 0, \quad (16)$$

где введены обозначения:

$$B = C_{10}\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_0}\right) + C_{21}\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right) + C_{20}\left(\frac{1}{M_2} + \frac{1}{M_0}\right), \quad (17)$$

$$D = \frac{M_1 + M_2 + M_0}{M_1 M_2 M_0} (C_{10} C_{21} + C_{10} C_{20} + C_{21} C_{20}). \quad (18)$$

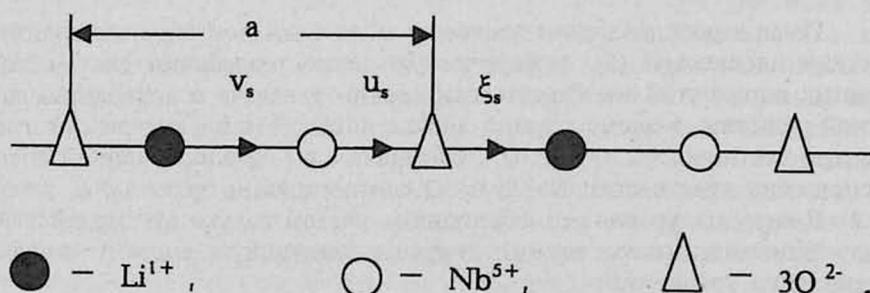


Рис. 2. Линейная решетка ионов  $Li^{1+}$ ,  $Nb^{5+}$  и  $3O^{2-}$ , заменяющая систему кристаллических плоскостей в НЛ.

Для частот оптических мод тогда получим:

$$\omega_{1,2}^2 = \frac{B}{2} \pm \sqrt{\frac{B^2}{4} - D}.$$

Формуле (19) можно придать более наглядный вид, разлагая входящий в нее квадратный корень по малому параметру  $4D/B^2$ :

$$\omega_2^2 = \frac{D}{B} = \frac{ne^2}{b} \frac{M_1 + M_2 + M_0}{M_1 M_2 M_0} \frac{P_1}{P_2}, \quad \omega_1^2 = B - \omega_2^2 \approx B, \quad (20)$$

где введены обозначения

$$P_1 = \frac{3}{2} q_0 R_{21} (R_{20} + R_{10}) - q_1 R_{20}^2 - q_2 R_{10}^2, \quad (21)$$

$$P_2 = \frac{R_{20}^2 R_{21} (R_{20} + R_{10})}{2q_2 M_1 M_0} (M_1 + M_2) + \frac{R_{10}^2 R_{21} (R_{10} + R_{20})}{2q_1 M_2 M_0} (M_2 + M_0) - \frac{(R_{20} R_{10})^2}{3q_0 M_1 M_2} (M_1 + M_2). \quad (22)$$

Множитель  $P_2$  при разумных значениях входящих в него параметров всегда положителен. Что касается множителя  $P_1$ , то он может менять знак. Таким образом, колебание с частотой  $\omega_2$  при определенном условии ( $D = P_1 = 0$ ), связанном с расположением ионов в элементарной ячейке и величинами их зарядов, может замораживаться в кристалле (ММ), на что кристалл реагирует тем, что в нем для восстановления законсервированного колебания должна произойти перегруппировка ионов около новых равновесных положений (происходит фазовый переход).

#### 4. Количественные вычисления

Подставляя в выражение (21) для  $P_1$  значение  $q_0 = 2$  а.е.,  $q_1 = 5$ ,  $q_2 = 1$ , для условия устойчивости критического колебания получим неравенство

$$R_{20}^2 - \frac{3}{8} (a - 2R_{10}) R_{20} - \frac{3}{8} a R_{10} + \frac{1}{2} R_{10}^2 \geq 0. \quad (23)$$

Решения неравенства (23) относительно  $R_{20}$ , при определенном значении  $R_{10}$ , располагаются в интервале  $[R_{20}^{(2)}, R_{20}^{(1)}]$ . Крайние точки этого интервала устойчивости  $R_{20}^{(2)}$  и  $R_{20}^{(1)}$  представляют собой корни соответствующего квадратного уравнения (23):

$$R_{20}^{(1,2)} = \frac{3}{16} \left[ a - 2R_{10} \pm \sqrt{\left( a + \frac{10}{3} R_{10} \right)^2 - \frac{192}{9} R_{10}^2} \right]. \quad (24)$$

В крайних точках интервала  $[R_{20}^{(2)}, R_{20}^{(1)}]$  частота  $\omega_2$  обращается в нуль, а вне интервала она принимает мнимое значение. В таблице приведены вычисленные на основе формулы (24) крайние значения интервала устойчивости  $R_{20}^{(2)}$  и  $R_{20}^{(1)}$  (столбцы 5 и 6) для различных значений

параметра  $R_{10}$ , измеренных разными авторами для нескольких ионных составов кристалла НЛ. В четвертом столбце приведены экспериментальные значения для расстояний  $R_{20}$ . Видно, что в элементарной ячейке плоскость Li располагается по возможности близко к верхней границе интервала устойчивости  $R_{20}^{(1)}$  (в 7-ом столбце табл. приведены величины этого сближения). Тот факт, что Li-евая плоскость предпочитает располагаться близко к верхней границе зоны устойчивости (между плоскостями Nb и O на стороне длинного расстояния между ними), имеет свое простое объяснение: такое расположение энергетически более выгодно, поскольку, как следует из формулы (21), чем меньше  $\Delta R_{20}$ , тем меньше  $P_1$ , а, следовательно, и частота той критической моды  $\omega_2$ , которая должна обращаться в нуль при фазовом переходе. Как следует из данных, приведенных в 7-ом столбце таблицы, расстояние  $\Delta R_{20}$  настолько мало, что тепловое расширение кристалла может перебросить ион  $Li^{1+}$  из зоны устойчивости в зону, где частота критической моды становится мнимой, т.е. тепловое расширение кристалла, например, может стать причиной фазового перехода.

Таблица 1. Крайние значения  $R_{20}^{(1)}$  и  $R_{20}^{(2)}$  интервала устойчивости и частота мягкой моды, вычисленные для различных дефектных структур в НЛ.

Состав.	$\nu = N_{Li}/(N_{Li} + N_{Nb})$	$R_{10}, \text{Å}$	$R_{20}, \text{Å}$	$R_{20}^{(1)}, \text{Å}$	$R_{20}^{(2)}, \text{Å}$	$\Delta R_{10}$	$\omega_2 = \sqrt{n} \text{ см}^{-1}$	Литер.
ST	0,498	0,883	0,69	0,723	-0,519	0,03	274	[6]
CG	0,485	0,869	0,695	0,729	-0,515	0,034	280	[6]
HN	0,470	0,893	0,675	0,718	-0,522	0,018	218	[6]
ST	0,498	0,878	0,675	0,725	-0,52	0,05	350	[5]
CG	0,485	0,884	0,677	0,722	-0,52	0,045	330	[5]
		0,897	0,715	0,716	-0,52	0,001	133	[2]

ST – стехиометрический состав, CG – конгруэнтный, HN – нестехиометрический,  $N_{Li}$  – число ионов Li,  $N_{Nb}$  – число ионов Nb.

Подставляя в формулу (24) значение  $R_{10} = a/2 = 1,155 \text{Å}$ , которое ион Nb приобретает в высокотемпературной фазе, для экстремальных значений расстояния  $R_{20}$  в этом (и только в этом) случае получаются равные по модулю значения  $(R_{20} = \pm a/4)^2$ . Это свидетельствует о том, что в высокотемпературной фазе ионы  $Li^{1+}$  с равной вероятностью занимают равноудаленные от плоскости положения (об одном таком расположении ионов Li на расстоянии  $\pm 0,43 \text{Å}$  сообщено в [7]). Отметим, что в высо-

<sup>2)</sup> Эти значения получаются на основе применяемого в формуле (12) приближения для  $C_{12}$ , которое в окрестности фазового перехода становится довольно грубым. Более точные вычисления приводят к значению  $R_{20} = \pm 0,42 \text{Å}$  (для кристалла  $LiTaO_3$  эксперимент дает значение  $\approx 0,37 \text{Å}$  [1]).

котемпературной фазе расположение ионов  $\text{Li}^{1+}$  на кислородных плоскостях ( $R_{20} = 0$ ) также не противоречит условию устойчивости (23). Критическая мода в этом положении также является устойчивой, однако это положение не может реализоваться, поскольку оно энергетически не выгодно, т.к. для законсервирования критической моды здесь требуется большая затрата энергии.

Таким образом, наши вычисления подтверждают версию о том, что в параэлектрической фазе ионы Li не занимают положения на близкорасположенных кислородных плоскостях, а с равной вероятностью располагаются на одинаковом расстоянии по обе их стороны.

Результаты вычисления частот ММ  $\omega_2$  (при  $T = 0$ ), сделанного на основе формулы (20), приведены в 8-ом столбце таблицы. Приведенные там цифры необходимо умножить на величину  $\sqrt{n}$ , где  $n$  – показатель потенциальной энергии отталкивания (см. формулы (5),(9)). Совпадение с экспериментальным значением ( $\omega_2 \approx 250 \text{ см}^{-1}$  [10]) достигается при  $\sqrt{n} \approx 1$ . Отметим, что для взаимодействующих ионов  $n$  принимает значения в интервале [5 + 13]. В случае взаимодействующих плоскостей  $n$  может иметь малые значения, поскольку а) здесь при встречном движении соприкасаются не жесткие ионы (как в случае ион-ионного взаимодействия), а ион Li (или Nb) соприкасается с более эластичным образованием – с треугольником ионов кислорода, б) медленно меняющейся с расстоянием (по логарифмическому закону) функции электростатического взаимодействия плоскостей должна соответствовать медленно меняющаяся функция отталкивания.

Что касается другой, устойчивой оптической моды колебаний, то для ее частоты получено значение  $\omega_1 = 2,2 \cdot 10^{14} \sqrt{n} \text{ с}^{-1}$ .

Данное исследование стало возможным благодаря гранту AP1-101 фонда CRDF.

## ЛИТЕРАТУРА

1. M.E.Lines and A.M.Glass. Principles and application of ferroelectrics and related materials. Oxford, Clarendon Press, 1977.
2. Ю.С.Кузьминов. Электро-оптический и нелинейно-оптический кристалл ниобата лития. М., Наука, 1987.
3. Р.Блици, Б.Жекш. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. М., Мир. 1975.
4. Г.Стенли, Фазовые переходы и критические явления. М., Мир 1973.
5. S.C.Abrahams, P.Marsh. Acta Cryst., B42, 61 (1986), J. Phys. Chem. Solids, 34, 521 (1973),
6. N.Yi, K.Kitavura, F.Izumi, I.K.Yamamoto, T.Hayashi, H.Asano, and S.Kimura. J. of Solid State Chemistry, 101, 340 (1992).
7. H.Boysen and F.Altorfer. Acta Cryst., B50, 405 (1994).
8. D.R.Birnie. J. Am. Ceram. Soc., 74, 988 (1991).
9. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Электродинамика сплошных сред. М., Наука, 1982.
10. W.D.Johnston, I.P.Kaminov. Phys. Rev., 168, 1045 (1968).
11. J.L.Servoin and F.Gervais. Solid State Commun., 31, 387 (1979), Ferroelectrics, 25, 609 (1980).
12. S.V.Ivanova, V.S.Gorelik, and B.A.Strukov. Ferroelectrics, 21, 563 (1978).
13. A.Ja.Jayaraman and A.A.Balman. J. Appl. Phys., 60, 1208 (1986).
14. A.F.Penna, A.Chaves, and S.P.S.Porto. Solid State Commun., 19, 491 (1976).
15. C.Raptis. Phys. Rev., B38, 1007 (1988).

16. P.Prieto, A.Conzalo. Solid State Commun., 61, 437 (1987).
17. I.Tonoeno and S.Matsumura. J. Phys. Soc. Jap., 56, 163 (1987).
18. M.Zang and I.F.Scott. Phys. Rev., B34, 1880 (1986).
19. I.L.Vyas, G.P.Kothiyal, B.Ghosh, and M.K.Gupta. Cryst. Res. Technol, 30, 217 (1995).

LiNbO<sub>3</sub> ԲՅՈՒՐԵՂՈՒՄ ՄԵԳՆԵՏԱԷԼԵԿՏՐԱԿԱՆ  
ՓՈՒԼԱՅԻՆ ԱՆՅՄԱՆ ՄԱՍԻՆ

Ֆ. Պ. ՍԱՖԱՐՅԱՆ

Առաջարկված է LiNbO<sub>3</sub> բյուրեղում սեզնետալիկտրական փուլային անցման հասարակ մոդել, որը հենվում է այն ենթադրության վրա, որ անցման «փափուկ» մոդի դերում հանդես է գալիս Li<sup>1+</sup>, Nb<sup>5+</sup> և O<sup>2-</sup> իոնների բյուրեղային հարթությունների տատանումների օպտիկական ճյուղերից մեկը: Ստացված են բանաձևեր, որոնք թույլ են տալիս հաշվել «փափուկ» մոդի հաճախությունը և գտնել իոնների կոորդինատները բյուրեղի տարրական բջիջում թե սեզնետալիկտրական և թե պարալիկտրական փուլերում:

ON THE THEORY OF FERROELECTRIC TRANSITION IN LiNbO<sub>3</sub> CRYSTALS

F. P. SAFARYAN

A simple model of ferroelectric transition in LiNbO<sub>3</sub> crystals is considered. It is proposed that one of two optical modes of crystal planes (on which the Li<sup>1+</sup>, Nb<sup>5+</sup> and O<sup>2-</sup> ions are disposed) vibrations becomes as "soft" mode at the ferroelectric phase transition. The analytical expressions are obtained which allow to obtain frequencies of "soft" mode and to find the coordinates of ions in the crystal unit cell for the ferroelectric and paraelectric phases.

УДК 541.64

## ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД РАСПЛАВ-КРИСТАЛЛ В ГИБКОЦЕПНЫХ ПОЛИМЕРАХ, СОДЕРЖАЩИХ СТРУКТУРНЫЕ НЕРЕГУЛЯРНОСТИ

Р. А. ГАСПАРЯН<sup>2</sup>, К. А. МОВСИСЯН<sup>1</sup>, А. М. ОВСЕПЯН<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Горисский филиал государственного инженерного университета Армении,

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский государственный университет

(Поступила в редакцию 11 марта 1997г.)

Получены аналитические выражения для энтропии и теплоемкости в области фазового перехода расплав-кристалл в полимерах, содержащих структурные нерегулярности. Анализ этих выражений позволяет утверждать, что фазовый переход в таких полимерах наблюдается ниже термодинамической температуры плавления и является переходом первого рода.

Наличие в расплаве гибкоцепного полимера статистических структурных нерегулярностей приводит к тому, что в процессе кристаллизации возникают некристаллизующиеся области. Целью настоящей работы является анализ энтропии и теплоемкости в области фазового перехода расплав-кристалл в полимерах, содержащих структурные нерегулярности.

Средний линейный размер некристаллизующихся областей обозначим через  $r$ . Очевидно, что как  $r$ , так и среднее расстояние между ближайшими нерегулярностями или сшивками  $R_c$  (заметим, что  $R_c \sim N_c^{-1/3}$ , где  $N_c$  – концентрация некристаллизующейся компоненты в изучаемом гибкоцепном полимере) будут влиять на фазовый переход расплав-кристалл и, следовательно, должны быть включены в выражение для термодинамического потенциала образования кристаллического состояния в этих полимерах. Тогда зародышеобразование и последующая кристаллизация будут протекать в ограниченных областях с линейным размером  $R^* = R_c - r$ . Это допущение согласуется с экспериментом [1,2]. Тогда масштабным фактором, ограничивающим размер микрообласти  $L$  (под микрообластью понимается область, включающая в себя кристаллит и валентно связанную с ним аморфную прослойку [3]) в процессе кристаллизации полимеров со структурными нерегулярностями, следует считать величину  $R^*$ .

В работе [3] получено соотношение, описывающее зависимость термодинамического потенциала образования кристаллита толщиной  $l$  и с площадью поперечного сечения  $S$ :

$$\Delta g = 2\sigma_T S + C\sigma_\delta \sqrt{S \cdot l} + \frac{\sigma_0(1-X_c)}{1-X_c - LN_c^{1/3}} \cdot S \cdot \frac{l}{L-l} - \Delta h \left(1 - \frac{T}{T_{пл}^0}\right) \cdot S \cdot l, \quad (1)$$

где  $\sigma_T, \sigma_\delta$  — удельные торцевая и боковая поверхностные энергии,  $\Delta h$  и  $T_{пл}^0$  — соответственно, удельная энтальпия и температура плавления идеального макроскопического кристалла гомополимера, а  $C$  — константа, определяемая формой кристаллита.

Параметр  $\sigma_0$  обусловлен конформационным объединением аморфной прослойки, валентно связанной с кристаллитом, и описывается соотношением  $\sigma_0 = 3k\epsilon T/2a$  ( $k$  — постоянная Больцмана,  $\epsilon$  — относительное число аморфных участков цепей, валентно связанных с кристаллитом и конформационно препятствующих его росту,  $a$  — эффективная площадь поперечного сечения сегмента макромолекулы).

В выражении (1) мы полагали, что величина  $X_c$  связана с объемной долей некристаллизующейся компоненты  $N_c r^3$  соотношением  $X_c = r/R_c = N_c^{1/3} \cdot r$ .

Необходимо также привести выражение для удельного термодинамического потенциала образования микродвухфазного состояния в полимерах, содержащих структурные нерегулярности. Если учесть, что для этих полимеров доля объема, участвующая в кристаллизации, составляет  $1 - X_c^3$ , то для удельного термодинамического потенциала получим соотношение

$$\Delta G = [(1 - X_c^3) / L \cdot S] \Delta g.$$

Тогда выражение для удельного термодинамического потенциала образования микродвухфазного кристаллического состояния в гибкоцепных полимерах, содержащих структурные нерегулярности, в зависимости от концентрации  $N_c$  и объемной доли  $X_c$  некристаллизующейся компоненты, примет вид

$$\Delta G = \frac{1 - X_c^3}{L} \cdot \left[ 2\sigma_T + C\sigma_\delta \sqrt{l/S} - \Delta h \left(1 - \frac{T}{T_{пл}^0}\right) l + \frac{\sigma_0(1 - X_c)l}{(1 - X_c - LN_c^{1/3})(L - l)} \right]. \quad (2)$$

### 1. Энтропия и теплоемкость

Подставляя выражение (1) в условия экстремума

$$\left(\frac{\partial \Delta g}{\partial l}\right)_{L,S} = 0; \quad \left(\frac{\partial \Delta g}{\partial S}\right)_{L,l} = 0, \quad (3)$$

при условии, что равновесная толщина  $L^*$  "микрообласти" определяется из условия минимума  $\Delta G$ , получим соотношение

$$2\sigma_T + C\sigma_\delta l / 2\sqrt{S} - \frac{\sigma_0(1 - X_c)}{1 - X_c - N_c^{1/3} L^*} \cdot \left[ \frac{l}{L^* - l} \right]^2 = 0, \quad (4)$$

описывающее линию равновесного кристаллического перехода в плоскости  $(l, S)$  для полимеров, содержащих структурные нерегулярности. Будем предполагать, что степень переохлаждения  $\Delta T$  и концентрация  $N_c$

некристаллизирующей компоненты таковы, что выполняется условие  $\sqrt{S_0^*}/R_c \ll 1$  (где  $\sqrt{S_0^*} = C\sigma_\sigma T_{n\Delta}^0/\Delta h\Delta T$  – критический поперечный размер кристаллического зародыша. Для полимеров, содержащих структурные нерегулярности, будем считать, что  $S_k$  является ограниченной и равной  $R_c$ . Если учесть, что  $l_k \sim l_0^* = 4\sigma_\tau T_{n\Delta}^0/\Delta h\Delta T$ , то можно показать, что  $C\sigma_\sigma l_k/4\sigma_\tau \sqrt{S_k} \sim \sqrt{S_0^*}/R_c \ll 1$ , где  $l_0^*$  – критическая толщина зародыша. Тогда соотношение (4) позволяет определить конечную толщину  $l_k$  кристаллита в гибкоцепных полимерах, содержащих структурные нерегулярности:

$$4\sigma_\tau - \frac{\sigma_0(1-X_c)}{1-X_c - N_c^{1/3}L^*} \cdot \left[ \frac{l_k}{L^* - l_k} \right]^2 = 0. \quad (5)$$

Подставляя (2) с учетом соотношения (1) в условие минимума

$$(\partial \Delta G / \partial l)_l = 0; \quad S/l \gg 1, \quad (6)$$

получим уравнение

$$2\sigma_\tau - \Delta h \frac{\Delta T}{T_{n\Delta}^0} \cdot l_k + \frac{\sigma_0(1-X_c)l_k}{(1-X_c - N_c^{1/3}L^*)(L^* - l_k)} \cdot \left[ \frac{2L^* - l_k}{L^* - l_k} - \frac{L^* N_c^{1/3}}{1-X_c - N_c^{1/3}} \right] = 0. \quad (7)$$

Решая уравнения (5) и (7) методом итерации, получим следующие соотношения для конечной толщины кристаллита:

$$l_k = \frac{l_0^*(1-X_c)}{\alpha_0(1-X_c - N_c^{1/3}l_0^*/\alpha_0^2)} \quad (8)$$

и равновесной толщины микрообласти

$$L^* = \frac{l_0^*(1-X_c)}{\alpha_0^2(1-X_c - N_c^{1/3}l_0^*/\alpha_0^2)}, \quad (9)$$

где

$$l_0^* = \frac{4\sigma_\tau T_{n\Delta}^0}{\Delta h\Delta T}. \quad (10)$$

Величина  $\alpha_0$ , которую мы ввели как  $\alpha_0 = l_k/L^*$ , определяется из следующего итерационного соотношения:

$$\alpha_0 = 1 / \left[ 1 + \sqrt{\frac{3k\epsilon T(1-X_c)}{4\sigma_\tau a(1-X_c^{1/3} - l_0^* N_c^{1/3}/\alpha_0^2)}} \right]. \quad (11)$$

Необходимо отметить, что конечная степень кристалличности полимеров, содержащих структурные нерегулярности, несколько отличается от величины  $l_k/L^*$ . Степень кристалличности  $\alpha_k$  нетрудно связать с величиной  $\alpha_0$ . В самом деле,  $\alpha_k = Nl_k S_k = NL^* S_k \alpha_0 = (1 - N_c r^3) \alpha_0$  ( $N_c r^3$  – доля объема полимера, не подвергающаяся кристаллизации). Тогда для степени кристалличности гибкоцепных полимеров, содержащих структурные нерегулярности, получим следующую зависимость

от концентрации  $N_c$  и объемной доли  $X_c^3$  некристаллизующейся компоненты:

$$\alpha_k = [1 - X_c^3] / \left[ 1 + \sqrt{\frac{3k\epsilon T(1 - X_c)}{4\sigma_T a(1 - X_c - l_0^* N_c^{1/3} / \alpha_0^2)}} \right]. \quad (12)$$

Выражение (2), с учетом формулы (1), позволяет определить изменение удельной энтропии  $\Delta S$ , возникающее в процессе перехода расплава в микродвухфазное кристаллическое состояние при заданной температуре изотермической кристаллизации:

$$\Delta S = (\partial \Delta G / \partial T)_{L=L^*, l=l_k} = (1 - X_c^3) \left[ \frac{\Delta h}{T_{пл}^0} \alpha_0 + \frac{2\sigma_T}{l_k T_k} (1 - \alpha_0) \right]. \quad (13)$$

При получении выражения (13) мы учли условия (3) и (6). При  $\epsilon = 0$ , т.е. при отсутствии конформационно-энтропийной связи, согласно (11),  $\alpha_0 = 1$  и соотношение (13) приводит к величине скачка энтропии  $\Delta S = (1 - X_c^3) \Delta h / T_{пл}^0$ , наблюдаемого в процессе фазового перехода первого рода при плавлении низкомолекулярных соединений, содержащих некристаллизующиеся дефекты. С учетом соотношений (8) и (10) выражение (13) приводится к виду

$$\Delta S = \frac{\Delta h}{T_m^0} \alpha_k + \frac{\Delta h \Delta T}{2T_{пл}^0 T_k} \alpha_k (1 - \alpha_0). \quad (14)$$

Из выражения (14) следует, что изменение удельной теплоемкости в зависимости от температуры изотермической кристаллизации описывается соотношением

$$\Delta C_p = T(\partial \Delta S / \partial T) = \frac{\Delta h}{2T_c} \alpha_c (1 - \alpha_0) - \left[ T_c + \frac{\Delta T}{2} - \alpha_0 \Delta T \right] \frac{\Delta h}{2T_{пл}^0} \frac{\partial \alpha_c}{\partial T}. \quad (15)$$

## 2. Классификация фазового перехода

Так как размер микрообласти  $L$  является конечной величиной, то фазовый переход в гибкоцепных полимерах со структурными нерегулярностями должен содержать в себе черты фазового превращения, наблюдаемые в конечных системах.

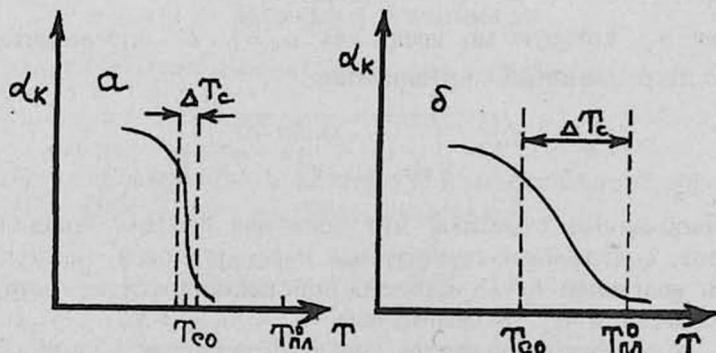


Рис.1. Возможные типы поведения  $\alpha_k$  в окрестности фазового перехода вблизи  $T_{c0}$ .

Для выяснения природы фазового перехода при  $T_{c0}$  необходимо обратиться к температурной зависимости параметра  $\alpha_k$  в окрестности  $T_{c0}$ . На рис.1 приведены два возможных типа поведения  $\alpha_k$  в окрестности фазового перехода. Нетрудно заметить, что для гибкоцепных полимеров, содержащих структурные нерегулярности, согласно выражению (12), температурная зависимость  $\alpha_k$  имеет вид, показанный на рис.1а, причем ширина перехода  $\Delta T_c \ll T_{п.а}^0 - T_{c0}$ . В этом случае можно утверждать, что в области фазового перехода существуют два минимума термодинамического потенциала и, соответственно, два устойчивых состояния, каждое из которых является термодинамически стабильным по одну сторону от точки фазового перехода и метастабильным с другой его стороны. Но тогда по общей классификации фазовых переходов [4,5,6] можно утверждать, что фазовое превращение кристалл-расплав в гибкоцепных полимерах, содержащих структурные нерегулярности, является фазовым переходом первого рода.

## ЛИТЕРАТУРА

1. L.Mandelkern et al. J. Am. Chem. Soc., 82, 46 (1960).
2. D.T.Roberts, L.Mandelkern. J. Am. Chem. Soc., 82, 1091 (1960).
3. К.А.Мовсисян, Р.А.Гаспарян, А.М.Овсепян. Кристаллизация полимеров, содержащих структурные нерегулярности. Изв. АН Армении, Физика, 27, 92 (1992).
4. Ф.Дайсон, Э.Монтролл, М.Кац, М.Фишер. Устойчивость и фазовые переходы. М., Мир, 1973.
5. Р.А.Гаспарян, В.Г.Баранов, М.А.Мартынов, С.Я.Френкель. Высокомолекулярная химия, 34, №6, 63 (1992).
6. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Статистическая физика, ч.1. М., Наука, 1976.

## ՀԱՆՈՒՅԹ-ԲՅՈՒՐԵՂ ՓՈՒԼԱՅԻՆ ԱՆՅՈՒՄԸ ԿԱՌՈՒՅՎԱԾՔԱՅԻՆ ԱՆԿԱՆՈՆՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐ ՊԱՐՈՒՆԱԿՈՂ ԴՎՈՒՆ ԸՂԹԱՆԵՐՈՎ ՊՈԼԻՄԵՐՆԵՐՈՒՄ

Ռ. Ա. ԳԱՍՊԱՐՅԱՆ, Կ. Հ. ՄՈՎՍԻՍՅԱՆ, Ա. Մ. ՀՈՎՍԵՓՅԱՆ

Ստացված է անալիտիկ արտահայտություն էնտրոպիայի և ջերմունակության միջև կախման համար կառուցվածքային անկանոնություններ պարունակող ճկուն շղթաներով պոլիմերներում, հալույթ-բյուրեղ փուլային անցման տիրույթում:

## MELT-CRYSTAL PHASE TRANSITION IN FLEXIBLE-CHAIN POLYMERS HAVING STRUCTURAL IRREGULARITIES

R. A. GASPARYAN, K. A. MOVSISYAN, A. M. HOVSEPYAN

Analytical expressions are obtained for the entropy and heat capacity in the domain of the melt-crystal phase transition in polymers with structural irregularities. Analysis of these expressions allows to state that the phase transition in such polymers is observed at the temperature below the thermodynamical melting point and is a first-kind transition.

## К 60-ЛЕТИЮ АКАДЕМИКА Д.М. СЕДРАКЯНА



9 декабря 1998г. исполнилось 60 лет со дня рождения известного армянского физика-теоретика Давида Мгеровича Седракяна.

Д.М.Седракян родился в г. Ереване в семье служащих. Его научная деятельность началась в 1961г. После окончания ЕГУ, где под руководством акад. Г.С.Саакяна им была опубликована первая статья, он поступает в аспирантуру Физического института им.Лебедева АН СССР. Здесь, в лаборатории теоретической физики он занимается дифракционным излучением заряженных источников с использованием метода Винера-Хопфа. Получив точные решения некоторых задач по этой проблеме под руководством Б.М.Болотовского, он в 1964г. защищает кандидатскую диссертацию и возвращается в Ереван, где до 1977г. работает в качестве доцента, а затем, после защиты докторской диссертации в 1972г., профессора кафедры теоретической физики ЕГУ.

С 1977г. по 1986г. Д.М.Седракян руководит работой кафедры общей физики, с 1986г. по 1990г. работает на должности академика-секретаря АН Армении, а в 1990-1994гг. – вице-президента Академии наук Армении. С 1994г. Д.М.Седракян – заведующий кафедрой общей физики ЕГУ. В 1982г. он избирается членом-корреспондентом АН Арм. ССР, а в 1990 – ее действительным членом.

Научную деятельность Д.М.Седракян после защиты кандидатской диссертации можно условно разбить на 4 этапа. В 1964-1972гг. он занимается проблемой вращения сверхплотных небесных тел. Им совместно с акад. Э.В.Чубаряном построена теория вращений конфигураций, описываемых однопараметрическими уравнениями состояния. Ее успешно применяют при описании физических процессов в широком классе звездных конфигураций – политропах, барионных звездах и белых карликах. Особо интересными являются найденные им решения уравнений общей теории относительности. Во втором периоде своей де-

тельности Д.М.Седракян изучает механизм генерации очень сильных магнитных полей во вращающихся нейтронных звездах. В эти годы им обнаружен новый физический эффект "увлечения свертекучих" протонов нейтронным конденсатом. С 1983г. Д.М.Седракян десять лет занимается исследованием явлений торможения пульсаров и их радиоизлучения. Он теоретически исследует динамику движения в пульсарах нейтронной вихревой сети, показав, что уменьшение ее плотности в течение времени приводит к увеличению периода вращения пульсаров. Им предложены три новых механизма торможения пульсаров, выделяемая при этом торможении тепловая энергия может привести к нагреву их поверхности до  $10^6 - 10^7$  К. В этом случае вращающаяся нейтронная звезда (пульсар) может быть компактным источником рентгеновского излучения. Д.М.Седракяном предложен новый механизм радиоизлучения этих объектов за счет его генерации на границе ядра и оболочки звезды и выхода к ее поверхности значительной энергии в радиодиапазоне. Многие из теоретически полученных им результатов подтверждены при наблюдениях этих объектов.

В четвертом периоде научной деятельности с 1993г. Д.М.Седракяном совместно с соавторами развита теория скачков и последующей релаксации угловой скорости пульсаров. Эта теория хорошо согласуется с наблюдениями ученых Корнельского университета (США), проведенными при исследованиях пульсара "Vela". В 1997г. Д.М.Седракян совместно с учеными Медонской обсерватории (Франция) в рамках релятивистской теории гравитации получил основные уравнения гидродинамики вращающейся свертекучей жидкости.

Наряду с вышеуказанными проблемами, имеющими важное значение для современной астрофизики, Д.М.Седракяном получен ряд важных результатов в области теории твердого тела и плазмы. Он автор 150 научных работ, получивших большой резонанс далеко за пределами Армении. Помимо проведения работ в вышеуказанных научных центрах, он тесно сотрудничает с учеными из обсерваторий Парижа и университета г. Росток (Германия).

Все эти годы Д.М.Седракян увлеченно читает ряд важных для формирования молодых физиков курсов, является автором учебного пособия по термодинамике. На возглавляемой им кафедре защищено 8 докторских диссертаций, Д.М.Седракян непосредственно сам "выпустил в жизнь" 7 кандидатов наук. С 1986г. Д.М.Седракян – главный редактор журнала "Доклады НАН РА". Он – член ряда специализированных и научных советов, возглавляет в НАН работу проблемного совета по физике. Д.М.Седракян ведет большую общественную работу, заботливо воспитывает молодежь, передавая ей свои глубокие знания и блестящую эрудицию. В общении с друзьями он непосредственен, с удовольствием искренне служит людям.

Редакция журнала и многочисленные друзья Д.М.Седракяна сердечно поздравляют его с 60-летним юбилеем, желают крепкого здоровья и счастья и не сомневаются, что его научно-педагогическая деятельность и в дальнейшем будет столь же плодотворной и результативной.

Редколлегия

<b>Ա.Հ.Հակոբյան, Գ.Լ.Հովհաննիսյան.</b> Ֆեմտոպայրկյանային լազերային ին-պուլսի տարածումը գծային դիսպերսային միջավայրում. ....	3
<b>Ա.Վ.Պապոյան, Գ.Ս.Սարգսյան, Գ.Հ.Սարգսյան.</b> Ցեզիումի նոսր գոլորշիների լազերային սպեկտրասկոպիան թույլ մագնիսական դաշտում. ....	8
<b>Մ.Մ.Աղասյան, Ա.Ա.Կիրակոսյան.</b> Էլեկտրոնի վիճակները ծածկույթով պատ-ված չափայնորեն քվանտացված կիսահաղորդչային լարում. ....	17
<b>Ա.Ա.Ավետիսյան, Ա.Պ.Ջոթյան, Է.Մ.Ղազարյան, Հ.Ա.Սարգսյան.</b> Ջրածնի ռեյատիվիստական ատոմը ուժեղ մագնիսական դաշտում. ....	24
<b>Կ.Ջ.Գրիգորյան.</b> Ինտենսիվ Բեսսելյան փնջի տարածումը $LiIO_3$ բյուրեղում.	29
<b>Ա.Ս.Վարդանյան, Է.Գ.Գազազյան, Ա.Գ.Տեր-Պողոսյան.</b> Չերենկովյան ճա-ռագայթման առանձնահատկությունները դիսպերսային դիէլեկտրա-կան միջավայրով լցված ալիքատարում. ....	35
<b>Ֆ.Պ.Սաֆարյան.</b> $LiNbO_3$ բյուրեղում սեզնետաէլեկտրական փուլային անցման մասին. ....	44
<b>Ո.Ա.Գասպարյան, Կ.Հ.Մովսիսյան, Ա.Մ.Հովսեփյան.</b> Հարյթ-բյուրեղ փու-լային անցումը կառուցվածքային անկանոնություններ պարունակող ճկուն շղթաներով պոլիմերներում. ....	55
<b>Ակադեմիկոս Գ.Մ.Սեդրակյանի 60-ամյակին.</b> ....	60

CONTENTS

<b>A.A.Akopyan, D.L.Oganesyan.</b> Propagation of a femtosecond laser pulse in a linear dispersive medium. ....	3
<b>A.V.Papoyan, G.S.Sarkisyan, D.H.Sarkisyan.</b> Laser spectroscopy of dilute cesium vapor in a weak magnetic field. ....	8
<b>M.M.Aghasyan, A.A.Kirakosyan.</b> Electron states in a size-quantized semiconductor wire with coating. ....	17
<b>A.A.Avetisyan, A.P.Djotyan, E.M.Kazaryan, H.A.Sarkisyan.</b> Relativistic hydrogen atom in a high magnetic field. ....	24
<b>K.Z.Grigorian.</b> Propagation of intense Bessel beam in a $LiIO_3$ crystal. ....	29
<b>A.S.Vardanian, E.D.Gazazian, A.D.Ter-Pogossian.</b> Features of the Cherenkov radiation in a waveguide with a dispersive dielectric medium. ....	35
<b>F.P.Safaryan.</b> On the theory of ferroelectric transition in $LiNbO_3$ crystals. . .	44
<b>R.A.Gasparyan, K.A.Movsisyan, A.M.Hovsepian.</b> Melt-crystal phase transition in flexible-chain polymers having structural irregularities. . .	55
<b>On the 60th birthday of Academician D.M.Sedrakan.</b> ....	60

# СОДЕРЖАНИЕ

А.А.Акопян, Д.Л.Оганесян. Распространение фемтосекундного лазерного импульса в линейной дисперсной среде. . . . .	3
А.В.Папоян, Г.С.Саркисян, Д.Г.Саркисян. Лазерная спектроскопия разреженных паров цезия в слабом магнитном поле. . . . .	8
М.М.Агасян, А.А.Киракосян. Состояние электрона в размерно-квантованной полупроводниковой проволоке с покрытием. . .	17
А.А.Аветисян, А.П.Джотян, Э.М.Казарян, А.А.Саркисян. Релятивистский атом водорода в сильном магнитном поле. . . . .	24
К.З.Григорян. Распространение интенсивного бесселевого пучка в кристалле йодата лития. . . . .	29
А.С.Варданын, Э.Д.Газазян, А.Д.Тер-Погосян. Особенности черенковского излучения в волноводе с дисперсной диэлектрической средой. . . . .	35
Ф.П.Сафарян. К теории сегнетоэлектрического перехода в кристалле $\text{LiNbO}_3$ . . . . .	44
Р.А.Гаспарян, К.А.Мовсисян, А.М.Овсепян. Фазовый переход расплав-кристалл в гибкоцепных полимерах, содержащих структурные нерегулярности. . . . .	55
К 60-летию академика Д.М.Седракяна. . . . .	60

Отпечатано на копи-принтере Rex Rotary CP1280  
фирмы RICOH

Заказ №1. Тираж 200.

Сдано в набор 25.12.98. Подписано к печати 12.02.99.

Печ. л. 4. Бумага КУМ-ultra. Цена договорная.

Издательство "Гитутюн" НАН РА. Компьютерная редакционно-издательская служба.  
375019, Ереван, пр. Маршала Баграмяна, 24-г.