PROCEEDINGS OF NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF ARMENIA

ՏԵՂԵԿԱԳԻԴ ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱՉԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ

ИЗВЕСТИЯ НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК <u>АРМЕНИИ</u>



# ΦИЗИКА- **ՖԻՉԻԿՍ**-PHYSICS

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. Мирзахании, ответственный секретарь

#### ԽՄԲԱԳՐԱԿԱՆ ԿՈԼԵԳԻԱ

Վլ. Մ. Հարությունյան, գլխավոր խմբագիր Է. Գ. Շառոյան, գլխավոր խմբագրի տեղակալ Վիլ. Մ. Հարությունյան Ա. Ա. Հախումյան Հ. Հ. Վարդապետյան Է. Մ. Ղազարյան Ա. Գ. Մելիջյան Վ. Օ. Պապանյան Ա. Ա. Միրզախանյան, պատասխանատու ջարտուղար

#### EDITORIAL BOARD

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

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

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

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

#### УДК 535:621.373.8

# СПОНТАННОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ ИЗ ОДЕТОГО СОСТОЯНИЯ ДВУХУРОВНЕВОГО АТОМА В КВАНТОВАННОМ ПОЛЕ МОНОХРОМАТИЧЕСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

#### А. Ж. МУРАДЯН, А. М. СЕДРАКЯН

#### Ереванский государственный университет

#### (Поступила в редакцию 9 марта 1998 г.)

В приближении Вигнера-Вайскопфа вычислены амплитуда распада возбуждения и спектр спонтанного излучения в системе атом+поле волны, когда квантованное поле волны находится в фоковских состояниях. Получено, что спектр излучения в общем случае расщепляется вместо трех на шесть линий. Появление новых частот обусловлено процессами комбинационного и многофотонного рассеяния.

#### 1. Введение

Проблема спонтанного излучения одиночного атома [1] развивалась, в основном, в двух направлениях. Одно из них включает наличие материальных сред в окружении излучающего атома [2], которые видоизменяют спектральный состав (плотность состояний) возможного излучения, влияя тем самым на вероятность спонтанного излучения [3-10]. Другим направлением исследований является излучение атома при наличии внешних полей, особенно квазимонохроматических волн с частотами, близкими к частотам атомного перехода. Излучение в этих условиях называется также резонансной флуоресценцией. Эта проблема, кроме познавательного значения, имеет и большое практическое значение, поскольку постоянно присутствует в режиме генерации лазерных источников, при взаимодействии лазерного излучения с резонансными средами и, наконец, в нелинейной спектроскопии сверхвысокого разрешения [11-13].

Резонансная флуоресценция атома в поле электромагнитной волны рассматривалась неоднократно как при классическом, так и при квантовом описании поля волны [14-20]. Фундаментальным результатом при этом является то, что лоренцевский контур излучения свободного атома в поле волны расщепляется, приобретая субструктуру. В случае интенсивного классического поля бегущей волны спектр флуоресценции состоит из трех линий, центральная из которых совпадает с частотой интенсивной волны и обусловлена релеевским рассеянием [15]. Одна из боковых линий совпадает с атомным переходом, смещенным из-за высокочастотного Штарк-эффекта, а вторая линия появляется из-за многофотонных нелинейных процессов рассеяния.

При рассмотрении спонтанных оптических переходов в квчестве базисных выбирались, как правило, ортонормированные состояния голого изолированного атома (классическое описание поля) или их произведения с фотонными состояниями (если внешнее поле квантовано). Однако при последовательном квантовомеханическом подходе следует в качестве базисных выбирать одетые атомные состояния [21] - собственные функции полного гамильтониана системы атом плюс квантованное поле электромагнитной волны. Хорошо известно, что в системе атом+поле такие стационарные состояния реализуются при больших значениях расстройки резонанса [22]. Спонтанное излучение из одетых состояний при классическом описании поля исследовано в [23], а при когерентно квантованном поле [24] рассмотрено в [25]. Однако при таком выборе квантования квантовые эффекты сильно подавляются и результаты практически совпадают с классическим описанием [23]. Поэтому в настоящей работе фотоны выбираются в фоковских состояниях, когда число фотонов имеет определенное значение и при котором квантование выявляется наиболее полно.

#### 2. Стационарные состояния системы атом+поле

Гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H}_{0} = \hat{H}_{a} + \hat{H}_{f} + \hat{V}, \qquad (1)$$

где

$$\hat{H}_a = \frac{\hbar\omega_0}{2}\sigma_3, \quad \hat{H}_f = \hbar\omega c^+ c, \quad \hat{V} = \hbar(\beta\sigma_- c^+ + \beta^*\sigma_+ c), \quad (2)$$

есть соответственно гамильтонианы изолированного атома, квантованного монохроматического поля и взаимодействия между атомом и полем;  $\omega_0$  и  $\omega$  – частоты атомного перехода и волны,  $\sigma_{\pm} = \sigma_1 \pm i \sigma_2$ ,  $\sigma_l$  (i = 1,2,3) – матрицы Паули, c и  $c^+$  – операторы уничтожения и рождения фотонов,  $\beta$  – постоянная взаимодействия, связанная с матричным элементом атомного перехода d соотношением  $\beta = -i(2\pi\omega/\hbar V)^{1/2}d$ , V – объем квантования. В этом представлении стационарные состояния изолированного двухуровневого атома (собственные функции оператора  $\hat{H}_a$ ) в основном и возбужденном состояниях даются матрицамистоя (1, 0, 1, 0). Начало координат совмещено с центром атома.

С гамильтонианом  $\hat{H}_0$  коммутирует оператор "числа возбуждений"

$$\hat{N} = \frac{1}{2}(\hat{I} + \sigma_3) + c^+ c, \qquad (3)$$

где  $\hat{I}$  – единичная матрица. Поэтому стационарные волновые функции уравнения Шредингера будем выбирать так, чтобы они были также собственными для оператора  $\hat{N}$ . Искомые функции имеют вид

$$\Psi_{g}(n) = N(n) \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \middle| n > + \frac{2\beta^{*} \sqrt{n}}{(\omega - \omega_{0})[1 + \sqrt{1 + \xi_{n}}]} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \middle| n - 1 > \right\} e^{-i\lambda gt}, \quad (4)$$

$$\Psi_{e}(n) = N(n) \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} | n-1 > -\frac{2\beta \sqrt{n}}{(\omega - \omega_{0})[1 + \sqrt{1 + \xi_{n}}]} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} | n > \right\} e^{-i\lambda_{e}t}.$$
 (5)

где  $N^2(n) = \left[1 + \sqrt{1 + \xi_n}\right] / 2\sqrt{1 + \xi_n}$  – нормировочный коэффициент,

$$\lambda_{g,e} = n\omega - \frac{\omega - \omega_0}{2} \left( 1 \mp \sqrt{1 + \xi_n} \right), \tag{6}$$

n – собственное значение оператора числа возбуждений  $\hat{N}$ ,  $\xi_n = \frac{4n|\beta|^2}{\Delta^2}$  – безразмерный параметр, классическим аналогом которого является ин-

тенсивность монохроматической волны. При адиабатически медленном выключении взаимодействия  $(\xi_n \to 0) \quad \Psi_g(n)$  переходит в основное состояние атома при наличии n фотонов, а  $\Psi_g(n)$  – в возбужденное состояние при наличии (n-1) фотонов.

#### 3. Спонтанное излучение

Процесс спонтанного распада подразумевает появление нового фотона, частота  $\omega'$  и волновой вектор k' которого не совпадают с частотой  $\omega$  и волновым вектором k монохроматической волны в условиях, когда в начальный момент времени (t = 0) в системе такие фотоны отсутствуют. Для учета "спонтанных" фотонов к гамильтониану (1) следует добавить

$$\hat{H}' = \sum_{\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}} \hbar \omega' c^+ (\mathbf{k}') c(\mathbf{k}') + \hat{W}, \qquad (7)$$

где первый член представляет энергию спонтанного фотона, а второй член

$$\widehat{W} = \sum_{\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}} (\beta(\mathbf{k}')\sigma_{-}c^{+}(\mathbf{k}') + \beta^{*}(\mathbf{k}')\sigma_{+}c(\mathbf{k}'))$$
(8)

описывает излучение и поглощение спонтанного фотона в резонансном приближении.

Заметим, что из-за наличия спонтанного процесса число возбуждений *n* не сохраняется. Возможные значения *n* для полной системы будут определяться как видом гамильтониана (8), так и кратностью актов спонтанного излучения. Следуя подходу Вигнера-Вайскопфа [1], ограничимся процессами однофотонного излучения-поглощения, т.е. предполагается, что в любой момент времени t > 0 в системе имеется один спонтанный фотон или он отсутствует. Согласно общим принципам квантовой механики, волновая функция полной системы может быть представлена в виде суперпозиции произведений базисных функций подсистем атом+поле ( $\Psi_g(n)$  и

 $\Psi_{e}(n), n = 0, 1, ...)$  и спонтанный фотон (|1k' >|):

$$\Psi_{iot} = \sum_{n,\mathbf{k}'} a_n(\mathbf{k}',t) \Psi_g(n) ||\mathbf{k}' > e^{-i\omega' t} + \sum_{n,\mathbf{k}'} b_n(\mathbf{k}',t) \Psi_e(n) ||\mathbf{k}' > e^{-i\omega' t} + \sum_n c_n(t) \Psi_g(n) ||\mathbf{0} > + \sum_n d_n(t) \Psi_e(n) ||\mathbf{0} > ,$$
(9)

где  $a_n, b_n, c_n$  и  $d_n$  есть искомые коэффициенты.

Подставляя эту волновую функцию в уравнение Шредингера с общим гамильтонианом  $H_{t0t} = H_0 + H'$ , выполним расчеты стандартного характера с целью получения уравнений для неизвестных амплитуд-ко-эффициентов. Они могут быть записаны в виде системы уравнений с постоянными коэффициентами:

$$i\frac{\partial A_{n}(\mathbf{k}',t)}{\partial t} - (\omega' - \omega + \delta_{n})A_{n}(\mathbf{k}',t) = \beta(\mathbf{k}')[W_{13}C_{n+1}(t) + W_{14}D_{n+1}(t)],$$

$$i\frac{\partial B_{n}(\mathbf{k}',t)}{\partial t} - (\omega' - \omega - \delta_{n})B_{n}(\mathbf{k}',t) = \beta(\mathbf{k}')[-W_{23}C_{n+1}(t) - W_{24}D_{n+1}(t)],$$

$$i\frac{\partial C_{n+1}(t)}{\partial t} - \delta_{n}C_{n+1}(t) = \sum_{\mathbf{k}'}\beta^{*}(\mathbf{k}')[W_{31}A_{n}(\mathbf{k}',t) - W_{32}B_{n}(\mathbf{k}',t)],$$

$$i\frac{\partial D_{n+1}(t)}{\partial t} + \delta_{n}D_{n+1}(t) = \sum_{\mathbf{k}'}\beta^{*}(\mathbf{k}')[W_{41}A_{n}(\mathbf{k}',t) - W_{42}B_{n}(\mathbf{k}',t)]$$
(10)

где  $\delta_n = \frac{\Delta}{2} \sqrt{1 + \xi_n}$ ,  $\Delta = \omega - \omega_0$  – расстройка резонанса,

$$W_{31} = W_{13}^* = N(n)N(n+1)\frac{2\beta\sqrt{n+1}}{\Delta(1+\sqrt{1+\xi_{n+1}})},$$

$$W_{32} = W_{23}^* = N(n)N(n+1)\frac{4\beta^2\sqrt{n(n+1)}}{\Delta^2(1+\sqrt{1+\xi_{n+1}})(1+\sqrt{1+\xi_n})},$$

$$W_{14} = W_{41} = N(n)N(n+1),$$

$$W_{42} = W_{24}^* = N(n)N(n+1)\frac{2\beta\sqrt{n}}{\Lambda(1+\sqrt{1+\xi_n})},$$
(11)

а новые амплитуды связаны с амплитудами в (9) соотношениями

$$A_{n}(\mathbf{k}',t) = a_{n}(\mathbf{k}',t)e^{-i(\omega'-\omega+\delta_{n})t}, \ C_{n+1}(t) = c_{n+1}(t)e^{-i\delta_{n+1}t},$$
  

$$B_{n}(\mathbf{k}',t) = b_{n}(\mathbf{k}',t)e^{-i(\omega'-\omega-\delta_{n})t}, \ D_{n+1}(t) = d_{n+1}(t)e^{i\delta_{n+1}t}.$$
(12)

Спонтанное излучение, согласно (10), связывает состояния с со-

седними значениями числа возбуждений. В рассматриваемом нами случае, когда фотонное поле монохроматической волны до взаимодействия находится в состоянии с определенным числом фотонов (фоковское состояние), в однофотонный процесс спонтанного излучения вовлекаются всего два соседних значения числа возбуждений.

Система (10) является точной и легко может быть обобщена, если фотонное поле (без взаимодействия) находится в более общем, например, глауберовском когерентном состоянии [24].

Для описания процесса спонтанного излучения с помощью уравнений (10) заметим, что возбужденный атом при одевании полем монохроматического поля переходит в состояние  $\Psi_e(n)$ . Поэтому начальные условия для (10) следует выбрать в виде

$$D_{n+1}(0) = 1, C_{n+1}(0) = B_n(\mathbf{k}', 0) = A_n(\mathbf{k}', 0) = 0.$$
(13)

В ходе же процесса все четыре возможные состояния полной системы перемешиваются: распадаясь из начального одетого состояния, порожденного из возбужденного состояния атома и n фотонов, система может і) с амплитудой  $C_{n+1}(t)$  перейти в одетое состояние, порожденное из невозбужденного атома и (n+1) фотонов, без появления спонтанного фотона; іі) с амплитудой  $b_n(\mathbf{k}',t)$  перейти в одетые состояния, порожденные из возбужденного же атома и (n-1) фотонов с появлением спонтанного фотона; ііі) с амплитудой  $a_n(\mathbf{k}',t)$  перейти в одетые состояния, порожденные из невозбужденного атома и n фотонов с появлением спонтанного фотона.

Используя преобразование Лапласа [25], в приближении Вигнера-Вайскопфа [1] для искомых амплитуд получаем

$$D_{n+1}(t) = P_1 e^{q_1 t} + P_2 e^{q_2 t}, (14)$$

$$C_{n+1}(t) = -W(\Gamma/2 - i\Pi) \left[ \frac{P_1}{q_1 - q_3} (e^{q_1 r} - e^{q_3 t}) + \frac{P_2}{q_2 - q_3} (e^{q_2 r} - e^{q_3 t}) \right], \quad (15)$$

$$B_n(\mathbf{k}',t) = i\beta(\mathbf{k}') \left\{ \frac{P_1}{q_1 - q_5} \left[ W_{24} - \frac{W_{23}W(\Gamma/2 - i\Pi)}{q_1 - q_3} \right] e^{q_1 t} - e^{q_5 t} + \frac{W_{23}W(\Gamma/2 - i\Pi)}{q_1 - q_3} \right] e^{q_1 t} - e^{q_5 t} + \frac{W_{23}W(\Gamma/2 - i\Pi)}{q_1 - q_3} e^{q_1 t} + \frac{W_{23}W(\Gamma/2 - i\Pi)}$$

$$+\frac{P_2}{q_2-q_5}\left[W_{24}-\frac{W_{23}W(\Gamma/2-i\Pi)}{q_2-q_3}\right](e^{q_2t}-e^{q_3t})+$$
(16)

$$+\left(\frac{P_1}{q_1-q_3}+\frac{P_2}{q_2-q_3}\right)\frac{W_{23}W(\Gamma/2-i\Pi)}{q_3-q_5}(e^{q_3t}-e^{q_5t})\bigg\},$$

$$A_n(\mathbf{k}',t) = -i\beta(\mathbf{k}') \left\{ \frac{P_1}{q_1 - q_4} \left[ W_{14} - W_{13}W \frac{(\Gamma/2 - i\Pi)}{q_1 - q_3} \right] (e^{q_1t} - e^{q_4t}) + \right.$$

$$+\frac{P_2}{q_2-q_4} \left[ W_{14} - W_{13}W \frac{(\Gamma/2 - i\Pi)}{q_2 - q_3} \right] (e^{q_2 t} - e^{q_4 t}) +$$
(17)  
$$\left( \frac{P_1}{q_1 - q_5} + \frac{P_2}{q_2 - q_5} \right) W_{13}W \frac{(\Gamma/2 - i\Pi)}{q_3 - q_4} (e^{q_3 t} - e^{q_4 t}) \bigg\},$$

где введены следующие обозначения:

$$\begin{split} P_{1,2} &= \frac{1}{2} \left\{ 1 \pm \frac{2\delta_{n+1} + \left(i\frac{\Gamma}{2} + \Pi\right) \left(1 - 2|W_{13}|^2 - 2|W_{23}|^2\right)}{\left[ \left(2\delta_{n+1} + i\frac{\Gamma}{2} + \Pi\right)^2 - i8\delta_{n+1} \left(\frac{\Gamma}{2} - i\Pi\right) \left(|W_{13}|^2 + |W_{23}|^2\right) \right]^{\frac{1}{2}}} \right\}, \\ q_{1,2} &= -\frac{1}{2} \left(\frac{\Gamma}{2} - i\Pi\right) \mp i \left[ \left(2\delta_{n+1} + i\frac{\Gamma}{2} + \Pi\right)^2 - i8\delta_{n+1} \left(\frac{\Gamma}{2} - i\Pi\right) \left(|W_{13}|^2 + |W_{23}|^2\right) \right]^{\frac{1}{2}}, \\ q_3 &= - \left(|W_{13}|^2 + |W_{23}|^2\right) \left(\frac{\Gamma}{2} - i\Pi\right) - i\delta_{n+1}, \quad q_{4,5} = -i(\omega' - \omega \pm \delta_n), \end{split}$$

$$W = W_{31}W_{14} + W_{32}W_{24};$$

а параметры Г и П определяются в полной аналогии со случаем спонтанного излучения свободного изолированного атома [1]:

$$\Gamma = 2\pi \sum_{\mathbf{k}'} \left| \beta(\mathbf{k}') \right|^2 \delta(\omega' - \omega), \quad \Pi = \sum_{\mathbf{k}'} P \frac{\left| \beta(\mathbf{k}') \right|^2}{\omega' - \omega},$$

первый из которых определяет скорость спонтанного распада, а второй — лэмбовское смещение атомного уровня свободного атома (символ *P* обозначает главную часть).

Первое, что следует из этих уравнений, то, что распад возбуждения не является одноэкспонентно-монотонным, а происходит по двум экспоненциальным каналам (см. (14)), причем каждый из каналов имеет свою среднюю скорость распада и частоту осцилляций. Второе заключается в том, что распад возбужденного состояния может происходить как с рождением спонтанного фотона (амплитуды  $B_n(\mathbf{k}',t)$  и  $A_n(\mathbf{k}',t)$ ), так и без него (амплитуда  $C_{n+1}(t)$ ). В последнем процессе система переходит в стационарное состояние, порожденное из (n+1) фотонов монохроматического поля и невозбужденного атома.

Атомный переход (аналог спонтанного распада свободного атома) представляется первым слагаемым в (17), релеевское рассеяние – первым слагаемым в (16). Остальные два слагаемых в (17) представляют процессы комбинационного типа, близкие по частоте к  $\omega$  падающей волны, а два слагаемых в (16) – многофотонные процессы, в результате которых из внешнего поля поглощаются два фотона частоты  $\omega$  и излучается новый фотон на частоте, близкой  $2\omega - \omega_0$ .

При представленном амплитудном описании процесса резонанс-

ной флуоресценции среднее число рожденных фотонов на новой частоте  $\omega'$  в момент времени t > 0 дается выражением

$$N_m(\mathbf{k}',t) = |a_m(\mathbf{k}',t)|^2 + |b_m(\mathbf{k}',t)|^2, \qquad (18)$$

а частотный спектр определяется асимптотическим видом при  $t \to \infty$ .

Если внешние фотоны частоты  $\omega$  полностью отсутствуют, то наши результаты, естественно, переходят в Вигнер-Вайскопфовские с одним максимумом в спектре излучения на частоте  $\omega_0$ . По мере увеличения числа фотонов (числа возбужлений n) в спектре сперва появляется релеевская частота, потом практически совпадающие с ней комбинационные частоты, а многофотонные процесы появляются в следующем порядке теории возмущений по параметру возмущения  $\beta \sqrt{n} / \Delta$ . В спектре в общем случае имеется шесть линий: одна линия на однофотонном оптическом переходе (аналог спонтанного перехода свободного атома), одна линия на релеевской частоте и по две линии комбинационного и трехфотонного характера. Последние четыре процесса, помимо вынужденного характера, пропорциональны разности населенностей энергетических уровней, переходами между которыми они обусловлены. Поэтому они отсутствуют как при малых интенсивностях, так и при асимптотически больших интенсивностях, когда населенности энергетических уровней выравниваются.

Работа выполнена в рамках научной темы 96-901, финансируемой из централизованных государственных источников РА.

#### ЛИТЕРАТУРА

- 1. V.Weisskopf, E.Wigner. Z. Phys., 63, 54, (1930), 65, 18 (1930).
- 2. В.П.Быков, Г.В.Шецелев. Излучение атомов вблизи материальных тел. М., Наука, 1986.
- 3. E.M.Purcell. Phys. Rev., 69, 681 (1946).
- 4. N.Blombergen, R.V.Pound. Phys. Rev., 95, 8 (1954).
- 5. M.W.P.Strandberg. Phys. Rev., 106, 617 (1957).
- 6. В.Е.Мкртчян, М.Л.Тер-Микаелян, В.О.Чалтыкян. ДАН Арм. ССР, 4, 178 (1983).
- 7. O.Kleppner. Phys. Rev. Lett., 47, 223 (1981).
- 8. P.Goy, I.M.Raimond, M.Gross, S.Haroche. Phys. Rev. Lett., 50, 1903 (1983).

9. D.F.Heinzen, M.S.Feld. Phys. Rev. Lett., 59, 2623 (1987).

- 10.E.Yablonovitch, T.I.Gmitter, R.Bhat. Phys. Rev. Lett., 61, 2546 (1988).
- П.А.Апанасевич, Основы теории взаимодействия света с веществом. Минск, Наука и техника, 1977.
- Л.Аллен, Дж.Эберли. Оптический резонанс и двухуровневые атомы. М., Мир, 1978.
- В.С.Летохов, В.П.Чеботаев. Принципы нелинейной лазерной спектроскопии. М., Наука, 1975.
- 14. M.C.Newstein. Phys. Rev., 167, 89 (1968).
- 15. B.R.Mollow. Phys. Rev., 188, 1969 (1969).
- 16. B.R.Mollow. Phys. Rev. A, 12, 1919 (1975).
- 17. H.I.Kimble, L.Mandel. Phys. Rev. A, 13, 2123 (1976).
- 18. W.Ren, I.D.Cresser, H.I.Carmichael. Phys. Rev. A, 46, 7162 (1992).
- 19. М.Л.Тер-Микаелян, А.О.Меликян. ЖЭТФ, 58, 281 (1970).
- 20. В.М.Арутюнян, А.О.Меликян. ДАН Арм. ССР, 50, 98 (1970).
- 21. C.Cohen-Tannoudji, S.Reynaud. J. Phys. B, 10, 345 (1977).

22. D.Grischkowsky, I.A.Armstrong. Phys. Rev. Lett., A6, 1566 (1972).

23. P.R.Berman. Phys. Rev. A, 53, 2627 (1996).

24. I.R.Klauder, E.C.G.Sudarshan. Fundamentals of quantum optics. N.Y., 1968.

25. S.Reynaud. Ann. Phys. (Paris), 8, 315 (1983).

# ԵՐԿՄԱԿԱՐԴԱԿԱՆԻ ԱՏՈՄԻ ՍՊՈՆՏԱՆ ճԱՌԱԳԱՅԹՈՒՄԸ ՀԱԳՆՎԱԾ ՎԻճԱԿԻՑ ՔՎԱՆՏԱՅՎԱԾ ՄՈՆՈՔՐՈՄԱՏԱՅԻՆ ճԱՌԱԳԱՅԹՄԱՆ ԴԱՇՏՈՒՄ

# Ա. Ժ. ՄՈՒՐԱԴՅԱՆ, Ա. Մ. ՄԵԴՐԱԿՅԱՆ

Դիտարկված է սպոնտան ֆոտոնի առաջացման պրոցեսը ատոմ+քվանտացված մոնոքրոմատային ալիք համակարգում։ ճառագայթման սպեկարը բաղկացած է վեց գծերից, որոնց ինտենսիվությունները ընդհանուր դեպքում էապես տարբեր են, իսկ ասիմպտոտային ինտենսիվ դաշտերում մնում են միայն երկու գծեր, որոնք համապատասխանում են առոմական անցմանը և ռելեյան ցրմանը։

### SPONTANEOUS EMISSION OF A TWO-LEVEL ATOM FROM A DRESSED STATE IN THE QUANTIZED MONOCHROMATIC RADIATION FIELD

#### A. ZH. MURADYAN, A. M. SEDRAKYAN

The process of creation of spontaneous photon in the "atom+quantized monocromatic field" system is considered. The spectrum of emission consists of six lines, the intensities of which are essentially different in general. In the asymptotic strong fields only two lines remain which correspond to the atomic transiton and Rayleigh scattering.

Известия НАН Армении, Физика, т.34, №2, с.75-80 (1999)

УДК 535.13

# ЧЕРЕНКОВСКИЙ МЕХАНИЗМ ИЗЛУЧЕНИЯ РАЗНОСТНОЙ ЧАСТОТЫ ОПТИЧЕСКИХ ВОЛНОВОДОВ

#### Ю. О. АВЕТИСЯН, А. Ж. БАБАДЖАНЯН, К. Н. КОЧАРЯН, Х. В. НЕРКАРАРЯН

#### Ереванский государственный университет

#### (Поступила в редакцию 24 июня 1998 г.)

Исследованы особенности генерации разностной частоты под углом Черенкова от симметричных и несимметричных оптических волноводов. Показано, что в результате пространственного ограничения оптических пучков на достаточно больших расстояниях мощность излучения разностной частоты достигает возможного предела. При этом можно избежать жесткого условия выполнения фазового синхронизма, которое в процесе волноводного режима распространения нарушается даже при незначительных неоднородностях структуры. Возможность эффективного преобразования частоты при мощностях, типичных для современных полупроводниковых лазеров, можно использовать для создания непрерывных и перестраиваемых источников излучения практически во всем инфракрасном диапазоне.

#### 1. Введение

Генерация излучения разностной частоты (ИРЧ) позволяет получать широкоперестраиваемое когерентное излучение в области спектра, где отсутствуют лазерные источники, в частности, в дальнем инфракрасном диапазоне длин волн [1,2]. Хотя появление лазеров фемтосекундной длительности открывает новые возможности для создания источников в терагерцовой области частот [3,4], однако импульсный характер и узкий диапазон частотной перестройки ограничивают их использование на практике. В последние годы возросший интерес к ИРЧ обусловлен бурным развитием техники оптических волноводов и полупроводниковых лазеров [5]. Волноводы обеспечивают высокую концентрацию светового поля на большой длине, что позволяет реализовать высокоэффективное ИРЧ при мощностях, типичных для современных полупроводниковых лазеров.

Таким образом, открывается переспектива для создания компактного, интегрированого с GaAs-лазером, когерентного генератора терагерцовой области частот. Важно подчеркнуть, что в оптическом волноводе легко удовлетворить условие генерации ИРЧ под углом Черенкова. На возможность черенковского механизма генерации ИРЧ в нелинейной среде впервые было указано Аскарьяном [6], а генерация экспериментально зарегистрирована Погосяном и др. [7].

Главным достоинством черенковского механизма является возможность генерации ИРЧ без обеспечения жесткого условия фазового синхронизма. Кроме того, поскольку генерируемое излучение распространяется под углом к оси оптического волновода, то его поглощение определяется поперечными (а не продольными) размерами волновода. Все это определяет, в настоящем, большой объем публикаций по черенковской генерации второй гармоники от инфракрасных лазеров. Однако вопросы, связанные с черенковской генерацией излучения в терагерцовой области частот в нелинейных оптических волноводах, остаются еще мало изученными.

В настоящей работе исследуется черенковский механизм генерации ИРЧ в планарных оптических волноводах двух различных конфитураций. В случае симметричного волновода предполагается, что нелинейное преобразование осуществляется в промежуточной области. Этот простой случай позволяет выявить и проанализировать основные закономерности генерации ИРЧ в планарном волноводе. В несимметричном волноводе в качестве нелинейной среды выступает подложка. Этот случай примечателен тем, что он учитывает структурные особенности существующих волноводов, и его осуществление на эксперименте не связано с принципиальными сложностями.

Пусть в качестве оптического волновода выступает структура, в которой промежуточный слой с показателем преломления  $n_2$  и толщиной *d* ограничен диэлектриками с показателями преломления  $n_1$  и  $n_3$  ( $n_2 > n_1, n_3$ ). Полагаем, что по волноводу распространяются две поперечные электрические (TE) волны с частотами  $\omega_1$  и  $\omega_2$  ( $\omega_1 > \omega_2$ ). Декартовые координаты выбираем таким образом, что плоскость *yz* совпадает с границей раздела между средами с показателями преломления  $n_1$  и  $n_2$ , при этом оптические волны распространяются по оси *z*, а напряженности электрических полей волн направлены по оси *y*.

#### 2. Случай симметричного волновода

Рассмотрим вначале случай, когда  $n_1 = n_3$ , а в качестве нелинейной среды выступает промежуточный слой, где напряженности электрических полей световых волн определяются соотношениями [5]

$$E_{y}^{(\nu)} = A_{\nu} \cos\left[k_{\nu}\left(x - \frac{d}{2}\right)\right] e^{i(\beta_{\nu}x - \omega_{\nu}t)}, \qquad 0 < x < d, \quad \nu = 1, 2, \qquad (1)$$

где

$$k_{\nu}^{2} + \beta_{\nu}^{2} = n_{2}^{2}(\omega_{\nu})\frac{\omega_{\nu}^{2}}{c^{2}} \equiv \operatorname{tg}^{2}\left[\frac{d}{2}\sqrt{n_{2}^{2}(\omega_{\nu})\omega_{\nu}^{2} - c^{2}\beta_{\nu}^{2}}\right] = -\frac{n_{1}^{2}(\omega_{\nu})\omega_{\nu}^{2} - c^{2}\beta_{\nu}^{2}}{n_{2}^{2}(\omega_{\nu})\omega_{\nu}^{2} - c^{2}\beta_{\nu}^{2}}.$$
 (2)

В условиях, когда вектор нелинейной поляризации *P<sub>NL</sub>* направлен по оси *у*, волновое уравнение для напряженности электрического поля разностной частоты принимает следующий вид:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} + n_2^2(\Omega)\frac{\Omega^2}{c^2}\right]E_y = -\frac{4\pi\Omega^2}{c^2}P_{NL},$$
(3)

здесь

$$P_{NL} = \frac{P_0}{2} [\cos(kx) + \cos(k'x)] e^{i(\beta x - \Omega t)}, \qquad (4)$$

где  $P_0 = \chi^{(2)} A_1 A_2^*$ ,  $k = k_1 - k_2$ ,  $k' = k_1 + k_2$ ,  $\beta = \beta_1 - \beta_2$ ,  $\Omega = \omega_1 - \omega_2$ ,  $\chi^{(2)}$  - значение нелинейной восприимчивости второго порядка. Решение уравнения (3) можно представить в виде

$$E_{y} = \left(B\cos(q_{2}x) + \frac{2\pi\Omega^{2}P_{0}}{c^{2}(k^{2} - q_{2}^{2})}\cos kx + \frac{2\pi\Omega^{2}P_{0}}{c^{2}(k'^{2} - q_{2}^{2})}\cos k'x\right)e^{i(\beta x - \Omega t)}, \ 0 < x < d, \ (5)$$

где

$$q_2^2 + \beta^2 = n_2^2(\Omega) \frac{\Omega^2}{c^2}.$$

Значение константы *В* определяется из граничных условий. Мы рассматриваем случай, когда  $\Omega \ll \omega_{\nu}$  ( $\nu = 1,2$ ), так что  $k^2 \ll k'^2$  и третьим членом в (5) можно пренебречь.

За пределами промежуточного слоя для электрического поля разностной частоты имеем:

$$E_{y} = \begin{cases} De^{i(q_{1}(x-d)+\beta x-\Omega t)}, & x > d \\ De^{i(-q_{1}x+\beta x-\Omega t)}, & x < 0 \end{cases}, \quad q_{1}^{2} + \beta^{2} = n_{1}^{2}(\Omega)\frac{\Omega^{2}}{c^{2}}. \tag{6}$$

Сшивая поля на границе раздела, получим:

$$D = \frac{[q_2 \sin(q_2 d) \cos(kd) - k \sin(kd) \cos(q_2 d) \frac{2\pi\Omega^2}{c^2} P_0}{[q_2 \sin(q_2 d) + iq_1 \cos(q_2 d)][k^2 - q_2^2]}$$

В рассмотренном нами случае  $q_2d \ll 1$ ,  $kd \ll 1$ , так что

$$D \approx \frac{2\pi i d \Omega^2 P_0}{q_1 c^2}.$$
 (7)

Разностная частота симметрично излучается в областях x > d и x < 0 под углом Черенкова 9:

$$\cos\vartheta = \frac{\beta c}{n_1(\Omega)\Omega}.$$
 (8)

Полагая, что  $n_2(\omega_1) \approx n_2(\omega_2)$ , для мощности ИРЧ в области x > d (x < 0) получим:

$$W_{s} = \frac{2^{4} \pi^{3} \Omega^{2} d^{2} (\chi^{(2)})^{2} l k_{1} k_{2}}{c^{3} n_{1}(\Omega) n_{2}^{2}(\omega_{1}) b \sin \vartheta} \Gamma_{s1} \Gamma_{s2} W_{1} W_{2} .$$
(9)

Здесь *l* – длина волновода, *b* – толщина оптического пучка, Г<sub>s1</sub> и Г<sub>s2</sub> – коэффициенты оптического ограничения для симметричного трехслойного диэлектрического волновода для ТЕ волн [8],  $W_1$  и  $W_2$  – мощности оптического излучения.

# 3. Случай несимметричного волновода

Рассмотрим теперь случай несимметричного волновода:  $n_2 > n_1$ ;  $n_3$ . Пусть оптической нелинейностью обладает среда с показателем преломления  $n_1$ , где напряженности электрических полей световых волн в волноводном режиме распространения определяются соотношениями

$$E_{y}^{(\nu)} = A_{\nu} e^{\gamma_{\nu} x + i(\beta_{\nu} z - \omega_{\nu} t)}, \quad \beta_{\nu}^{2} - \gamma_{\nu}^{2} = n_{1}^{2}(\omega_{\nu}) \frac{\omega_{\nu}^{2}}{c^{2}}, \quad \nu = 1, 2.$$
(10)

В данном случае в волновом уравнении (3) в качестве нелинейной поляризации выступает функция

$$P_{NL} = P_0 e^{j \alpha + i (\beta t - \Omega t)}, \qquad (11)$$

где  $P_0 = \chi^{(2)} A_1 A_2^*$ ,  $\gamma = \gamma_1 + \gamma_2$ ,  $\beta = \beta_1 - \beta_2$ ,  $\Omega = \omega_1 - \omega_2$ . Тогда решения уравнения (3) в области x < 0 можно представить в виде

$$E_{\gamma} = \left(Be^{-iq_{1}x} - \frac{4\pi\Omega^{2}P_{0}}{c^{2}\gamma^{2}}e^{jx}\right)e^{-(\beta x - \Omega t)}, \ q_{1}^{2} + \beta^{2} = n_{1}^{2}(\Omega)\frac{\Omega^{2}}{c^{2}}.$$
 (12)

В несимметричном волноводе значение  $n_1$  может заметно превосходить  $n_3$ , поскольку в роли третьей среды, как правило, выступает воздух. В условиях, когда

$$\frac{\beta c}{n_1(\Omega)\Omega} < 1 < \frac{\beta c}{n_3(\Omega)\Omega},\tag{13}$$

волна с разностной частотой Ω распространяется исключительно в среде с показателем преломления  $n_1$ . Тогда для электрического поля разностной частоты в области x > 0 получим:

$$E_{\gamma} = De^{-\gamma x + l(\beta x - \Omega t)}, \quad \beta^2 - \gamma^2 = n_3^2(\Omega) \frac{\Omega^2}{c^2}.$$
 (14)

В рассмотренном нами случае  $\Omega << \omega_{\nu}$  ( $\nu = 1,2$ ), когда  $n_2(\Omega)\Omega d/c << 1$ , роль промежуточного слоя для волны с частотой  $\Omega$  несущественна, и из граничных условий несложно получить

$$B \approx -\frac{4\pi \,\Omega^2 P_0}{c^2 \gamma(q_3 + iq_1)}.$$
 (15)

Поскольку в несимметричном волноводе максимум  $|E_y|^2$  оптического излучения в волноводном слое сдвигается по направлению к слою с большим показателем преломления, то в рассматриваемых нами условиях, когда  $n_1 > n_3$ , основная часть мощности оптической волны вне волновода сосредоточена в среде с показателем преломления  $n_1$  [9]. В результате мощность ИРЧ в среде с показателем преломления  $n_1$  опре-

#### деляется соотношением

$$W_{ns} = \frac{2^8 \pi^3 \Omega^2 n_1^2(\Omega) \gamma_1 \gamma_2(\chi^{(2)})^2 l \sin \theta}{c^3 \left[ n_1^2(\Omega) - n_3^2(\Omega) \right] (\gamma_1 + \gamma_2)^2 b n_1^2(\omega_1)} (1 - \Gamma_{ns1}) (1 - \Gamma_{ns2}) W_1 W_2.$$
(16)

где 9 - угол черенковского излучения.

Оценим мощность ИРЧ как для симметричного, так и для несимметричного волноводов. В качестве сердцевины волновода возьмем ниобат лития (LiNbO<sub>3</sub>) с диффундированными атомами титана (Ti), для нее в качестве подложки служит кристалл ниобата лития. В несимметричном волноводе среда с показателем преломления  $n_3$  является воздухом. В рассмотренном частотном диапазоне ( $\omega_1 = 2355 \cdot 10^{12}$  Гц,  $\omega_2 =$  $= 2354, 5 \cdot 10^{12}$  Гц)  $n_1$  (LiNbO<sub>3</sub>)  $\approx 2.214$ ,  $n_2$  (LiNbO<sub>3</sub>:Ti)  $\approx 2.296$  и  $n_3$  (воздух)=1. Для волновода возьмем следующие параметры: d = 2 мкм, l = 1 см,  $\Gamma_{s1} \approx \Gamma_{s2} = 0.7$ ,  $\Gamma_{ns1} \approx \Gamma_{ns2} = 0.3$ . Мощности оптических волн примерно  $10^6$  Вт, а b = 1 мм. Для ИРЧ получаем:  $\Omega = 471 \cdot 10^9$  Гц,  $\vartheta = 56^\circ$ ,  $W_s \approx 4.012$  мВт и  $W_{ns} \approx 2.65$  мВт.

#### 4. Заключение

Таким образом, в условиях черенковского механизма ИРЧ можно добиться достаточно эффективного преобразования как в симметричном, так и в несимметричном волноводах. Здесь в результате пространственного ограничения пучка на достаточно больших расстояниях мощность ИРЧ достигает возможного предела. При этом удается избежать жесткого выполнения условия фазового синхронизма, которое в процесе волноводного режима распространения нарушается даже при незначительных неоднородностях структуры.

Проведенные исследования позволяют также судить об особенностях черенковского ИРЧ в условиях многомодового режима распространения оптических волн. Нетрудно заметить, что в этом случае в угловом распределении ИРЧ можно наблюдать серию максимумов. Дело в том, что разность компонент волновых векторов для разных мод различна. Тогда, согласно (8), для каждой моды получается свой угол Черенкова. В частности, в приведенных выше условиях для несимметричного волновода получаем: для моды m = 0  $\mathcal{G}_0 = 56^\circ$ , для m = 1  $\mathcal{G}_1 = 50^\circ$  и для m = 2  $\mathcal{G}_2 = 43^\circ$ . Заметим, что исследуемый процесс реализуется в случае взаимодействия волн, принадлежащих исключительно одной и той же моде. В противном случае  $\beta$  настолько велико, что черенковское условие излучения (8) не выполняется. Таким образом, изучение углового распределения позволяет определить модовый состав оптического излучения в волноводе.

Простота и эффективность преобразования черенковского механизма генерации разностной частоты дают все основания для предположения, что это явление можно использовать для создания непрерывных и перестраиваемых источников излучения практически во всем инфракрасном диапазоне.

#### ЛИТЕРАТУРА

- 1. И.Р.Шен. Принципы нелинейной оптики. М., Наука, 1989.
- 2. Н.Бломберген. Нелинейная оптика. М., Мир, 1966.
- Nonlinear spectroscopy of solids: advances and applications. Plenum Press, New York and London, 1996.
- 4. W.M.Robertson. Optoelectronics techniques for microwave and millimeter-wave engineering. U.K., Artech House, 1995.
- 5. Интегральная оптика. М., Мир, 1978.
- Г.А.Аскарьян. ЖЭТФ, 42, 1360 (1962).
- 7. Д.А.Багдасарян, А.О.Макарян, П.С.Погосян. Письма в ЖЭТФ, 37, 498 (1983).
- 8. Х.Кейси, М.Паниш. Лазеры на гетероструктурах. М., Мир, 1981.
- 9. Х.Хаус. Волны и поля в оптоэлектронике. М., Мир, 1988.

# ՕՊՏԻԿԱԿԱՆ ԱԼԽՔԱՏԱՐՆԵՐՈՒՄ ՏԱՐԲԵՐԱՅԻՆ ՀԱճԱԽՈՒԹՅԱՆ ճԱՌԱԳԱՅԹՄԱՆ ՉԵՐԵՆԿՈՎՅԱՆ ՄԵԽԱՆԻՉՄԸ

#### ՅՈՒ. Հ. ԱՎԵՏԻՍՅԱՆ, Ա. Ժ. ԲԱԲԱՋԱՆՅԱՆ, Կ.Ն. ՔՈՉԱՐՅԱՆ, Խ. Վ. ՆԵՐԿԱՐԱՐՅԱՆ

Հետազոտված են համաչափ և ոչ համաչափ օպտիկական ալիքատարներում Չերենկովի անկյան տակ տարբերային հաճախության գեներացիայի յուրահատկությունները։ Յույց է տրված, որ բավական մեծ երկարությանների վրա օպտիկական փնջերի տարածական սահմանափակման արդյունքում տարբերային հաճախության ճառագայթման հզորությունը հասնում է հնարավոր սահմանին։ Ժամանակակից կիսահաղորդչային լազերներին հատուկ հզորությունների դեպքում հաճախության էֆեկտիվ ձևափոխության հնարավորությունը կարելի է օգտագոծել անընդհատ և գրեթե ամբողջ ինֆրակարմիր տիրույթում համալարվող ճառագայթման աղբյուրներ ստեղծելու համար։

#### CHERENKOV MECHANISM OF DIFFERENCE FREQUENCY RADIATION BY OPTICAL WAVEGUIDES

#### Y. H. AVETISYAN, A. J. BABADJANYAN, K. N. KOCHARYAN, KH. V. NERKARARYAN

Peculiarities of difference frequency generation radiated out by symmetric and nonsymmetric optical waveguides under the Cherenkov angle are studied. It is shown that as a result of space limitation of optical bunches at sufficiently large distances, the radiation power of difference frequency reaches the possible limit. At the same time, it is feasible to avoid the strict condition of phase matching which is violated in the process of waveguide propagation regime even when nonessential heterogeneity of the structure is present. The possibility of the effective frequency conversion within the powers typical to modern semiconductor lasers can be used to create continuous and tunable sources of radiation practically in the whole infrared range. Известия НАН Армении, Физика, т.34, №2, с.81-86 (1999)

УДК 621.3.024.76

# ИССЛЕДОВАНИЕ ЛАЗЕРНОЙ ПЛАЗМЫ УГЛЕРОДА И АЛЮМИНИЯ В ВУФ ОБЛАСТИ СПЕКТРА

#### Г. Ц. НЕРСИСЯН, В. О. ПАПАНЯН

#### Институт физических исследований НАН Армении,

#### К. М. ПОХСРАРЯН

НПО "Лазерная техника" при Ереванском государственном университете

#### (Поступила в редакцию 27 марта 1998 г.)

Исследовано ВУФ излучение лазерной плазмы, образованной в фокусе YAG:Nd лазера со средней мощностью на углеродной и алюминиевой мишенях. Диагностика плазмы возможна благодаря существованию локального термодинамического равновесия, найденного экспериментально. Электронная температура находится с помощью измерения отношений интенсивностей ионных линий. Концентрация электронов измеряется с помощью штарковского уширения линий алюминия. Средняя плотность электронов больше чем 10<sup>17</sup> см<sup>-3</sup> измерена в горячей зоне плазмы, которая простирается на расстояние 5 мм от поверхности мишени.

Вакуумное ультрафиолетовое (ВУФ) и мягкое рентгеновское излучение лазерной плазмы, образованной при фокусировании лазерного излучения, широко применяется, в частности, в спектроскопии и микроэлектронике [1,2]. Оптимизация работы источника такого излучения требует знания физических процессов, происходящих в лазерной плазме. Важными параметрами такой плазмы являются температура и плотность электронов, которые обычно определяются из спектроскопических измерений в плазме.

Особое место среди мишеней занимают атомные кластеры и большие молекулы, в которых происходит интенсивное поглощение лазерного излучения, обеспечивая тем самым эффективное столкновительное нагревание электронов, образование многозарядных ионов и генерирование высокоэнергетичных фотонов и ионов [3,4]. Так, в работе [5] при фокусировании лазерного излучения в газ, образующийся при испарении пленки С<sub>60</sub>, наблюдалось жесткое рентгеновское излучение и образование водородоподобных ионов углерода, которые отсутствуют при использовании обычного графита. В работе [6] отмечается перспективность молекулярных соединений в экспериментах по взаимодействию лазерного излучения с веществом, для целей эффективного преобразования лазерного излучения в рентгеновское и ВУФ излучения.

Так как перспективные молекулярные соединения, в частности,

31 2082 4PS/In-Anno

фуллерены и фталоцианины богаты атомами углерода, то имеет смысл подробное изучение углеродной плазмы. Далее, при изготовлении мишеней исследуемое вещество обычно напыляется на какую-нибудь подложку, атомы и ионы материала которой также присутствуют в образующейся плазме. Спектр излучения таких частиц дает дополнительную информацию о лазерной плазме [7]. Выбор чистого апюминия обусловлен тем, что большинство молекулярных мишеней наносятся на алюминиевые подложки.

В данной работе изучены спектры ВУФ излучения лазерной плазмы, образованной на мишенях из углерода и алюминия, и измерены температура ( $T_e$ ) и плотность ( $N_e$ ) электронов. Для определения электронной температуры использовалось отношение интенсивностей двух линий, принадлежащих ионам с различными кратностями ионизации. Чувствительность метода повышается благодаря тому, что разность энергий в больцмановском множителе увеличивается на величину энергии ионизации. Штарковское уширение линий сильными локальными электрическими полями в лазерной плазме позволяет определить электронную плотность.

Экспериментальная установка подробно описана в работах [1,8]. Лазерная плазма создается с помощью YAG:Nd лазера с длительностью импульса 10 нс и плотностью мощности излучения 10<sup>10</sup> Вт/см<sup>2</sup> при фокусировке (диаметр фокусного пятна около 100 мкм) на вращающуюся мищень из углерода или алюминия. Спектр лазерной плазмы регистрировался в диапазоне длин волн 50 + 270 нм с помощью вакуумного монохроматора ВМР-2, который со щелями менее 100 мкм обеспечивал аппаратное уширение ~ 0,1 нм. В установке поддерживался высокий вакуум 2·10<sup>-5</sup> Тор.

Для определения  $T_e$  углеродной плазмы использовалось отношение интенсивностей линий  $C^{3+} 253$  нм и  $C^{2+} 229,7$  нм. Как отмечается в [9], при электронной плотности  $N_e > 10^{17}$  см<sup>-3</sup> (экспериментальное определение  $N_e$  см. ниже) верхние уровни линий  $C^{3+}$  и  $C^{2+}$  находятся в локальном термодинамическом равновесии (ЛТР) по отношению к ионам  $C^{4+}$  и  $C^{3+}$ , соответственно. В приближении однородной нестационарной плазмы время установления ЛТР равно 1,3 нс. В этом приближении отношение интенсивностей линий иона  $C^{3+}(I')$  и  $C^{2+}(I)$  равно [9]

$$\frac{I'}{I} = \frac{fg'g_0}{fgg_0''} \left(\frac{\lambda}{\lambda'}\right)^3 (4\pi^{1.5}a_0^3 N_e) \left(\frac{E_H}{kT_e}\right)^{1.5} \frac{S}{\alpha + N_e\alpha_3} \frac{S'}{\alpha' + N_e\alpha_3'} \exp\left(\frac{E_{\infty} - E' + E}{kT_e}\right), \quad (1)$$

где  $f,g,\lambda$  и  $f',g',\lambda'$  – силы осцилляторов, статистические веса и длины волн излучения линий ионов C<sup>2+</sup> и C<sup>3+</sup>, соответственно,  $g_0,g_0''$  – статистические веса основных состояний для ионов в более низком и последующем более высоком состоянии ионизации, соответственно,  $S,\alpha,\alpha_3$  и  $S',\alpha',\alpha'_3$  – коэффициенты ионизации, излучательной и трехчастичной рекомбинаций двух ионизационных состояний,  $E_{\infty}$  – энергия ионизации иона с низкой степенью ионизации, E',E – энергии возбуждения верхних уровней линий ионов,  $a_0$  – радиус первой боровской орбиты, Ен - энергия ионизации атома водорода.

Электронная температура определяется решением уравнения (1) после измерения отношения интенсивностей в спектре. Полуэмпирические формулы для коэффициентов S, a, a, имеют следующий вид [10]:

$$S = \frac{9 \cdot 10^{-6} \xi_z \left(\frac{T_e}{E_{\infty}}\right)^{0.5}}{E_{\infty}^{1.5} \left(4,88 + \frac{T_e}{E_{\infty}}\right)} \exp\left(\frac{T_e}{E_{\infty}}\right) \text{ cm}^3 \cdot \text{c}^{-1}, \qquad (2)$$

$$\alpha = 5.2 \cdot 10^{-14} \left( \frac{E_{\infty}}{T_{e}} \right)^{0.5} Z \left[ 0.429 + 0.5 \lg \left( \frac{E_{\infty}}{T_{e}} \right) + 0.469 \left( \frac{T_{e}}{E_{\infty}} \right)^{0.5} \right] \text{ cm}^{3} \cdot \text{c}^{-1} , (3)$$

$$\alpha_3 = 2,97 \cdot 10^{-27} \frac{\xi_Z}{T_e} E_{\infty}^2 \left( 4,88 + \frac{T_e}{E_{\infty}} \right) c^{-1}, \qquad (4)$$

где  $\xi_Z$  – число электронов на внешней оболочке иона с зарядом Z. Для углеродной лазерной плазмы результаты измерений дают  $T_e \approx 8$  эB, что согласуется с результатом работы [10].

Электронная температура алюминиевой лазерной плазмы определялась из отношения интенсивностей линий  $Al^{3+}$  76,77 нм и  $Al^{2+}$  56 нм. Особенность спектра состоит в том, что в диапазоне длин волн 50-100 нм практически отсутствуют линии  $Al^{+}$  и  $Al^{2+}$  и большинство линий принадлежат иону  $Al^{3+}$ . Это доказывает изобилие ионов  $Al^{3+}$  в лазерной плазме. Так, соотношения плотностей частиц  $Al_{-}Al^{+}$ ,  $Al^{2+}$  и  $Al^{3+}$  в зависимости от температуры, полученные из уравнения Саха, представлены на рис.1. Очевидно, что в области температур 10-15 эВ плотность ионов  $Al^{3+}$  резко увеличивается и  $N_i^{3+}/N_i^{2+} \approx 10^4$ ,  $N_i^{2+}/N_i^{1+} \approx 10^4$ , где  $N_i^Z$  – плотность ионов с зарядом Z.





Для измерения плотности электронов в лазерной плазме исполь-

зован метод, основанный на сравнении измеренных и вычисленных ширин линий [11]. Наличие в горячей зоне лазерной плазмы заряженных частиц с большой плотностью приводит к штарковскому уширению и сдвигу центров большинства линий излучающих атомов и ионов. Причиной эффекта является сдвиг энергетических уровней излучающих атомов ионов при столкновении с электронами (ионами) [9,11,12].

Для измерения ширин выбраны сравнительно интенсивные линии, которые удалены от других линий (для предотвращения искажения контуров соседними линиями). Линии, у которых штарковские ширины значительно меньше, чем невозмущенные расстояния между взаимодействующими уровнями, считаются изолированными. Это условие было проверено для выбранных линий. Поскольку исследуемые линии лежат в областях спектра 160+200 нм и 220+270 нм, то для оценки уровня континуума (фонового излучения) использован диапазон спектра с центром на 210 нм и шириной ~10 нм, который практически лишен линейчатого спектра. Вычисление концентрации электронов производилось с помощью следующей формулы [11]:

$$\Delta\lambda = 2W \left(\frac{N_e}{10^{16}}\right) + 3.5 A \left(\frac{N_e}{10^{16}}\right)^{0.25} \left(1 - 1.2 N_D^{1/4}\right) W \left(\frac{N_e}{10^{16}}\right), \tag{5}$$

где  $\Delta\lambda$  – полуширина линии, W – ударная электронная полуширина при  $N_e = 10^{16}$  см<sup>-3</sup>, A – параметр ионного уширения,  $N_D$  – число частиц в дебаевской сфере. По отношению интенсивностей линий  $Al^{2+}$  и  $Al^{3+}$ найдена электронная температура, равная 10 эВ. Значения W и A, найденные с помощью аппроксимации для  $T_e = 10$  эВ, используя табличные значения из [9], приведены ниже в таблице. Ионная часть уширения составляет малую долю (~ 0,01 нм) [13] в основном уширении и не учитывалась.

В настоящей работе измерены штарковские профили более десяти линий Al и Al<sup>+</sup>. Расчетные штарковские уширения линий Al<sup>+</sup> 167.1 нм и 189.9 нм равны 10<sup>-3</sup>+10<sup>-2</sup> нм и 0.01+0.1 нм, соответственно, при шлотностях электронов 10<sup>17</sup>+10<sup>18</sup> см<sup>-3</sup>, типичных для рассматриваемой лазерной плазмы. Для выяснения вклада доплеровского уширения в общую ширину линий предпочтительно измерять контуры по крайней мере двух линий с сильно различающейся чувствительностью к эффекту Штарка. Предполагая независимость штарковского и доплеровского уширений, можно рассматривать ширину наименее чувствительной линии в качестве верхнего предела для доплеровского уширения. Действительно, аппаратное уширение не позволило измерить ширины таких линий, тем самым подтверждая, что доплеровское уширение меньше 0,1 нм. То есть измеренные контуры линий представляют свертку штарковского профиля и аппаратной функции, которая аппроксимировалась лоренцевским контуром. Таким образом были найдены истинные значения ширин исследуемых линий. Значения длин волн и полуширин четырех линий, а также измеренных концентраций электронов приведены в таблице 1. Из таблицы следует, что среднее значение плотности электронов в алюминиевой лазерной плазме равно (5±2)-10<sup>17</sup> CM<sup>-3</sup>.

Таблица 1.

λ, нм	W, 10 <sup>-3</sup> HM	Δλ, нм	$N_{\rm e}$ , $10^{17}  {\rm cm}^{-3}$
Al 237,34	13	0,34±0,03	1,3±0,5
Al <sup>+</sup> 247,53	3,9	0,55±0,05	7,0±2,8
Al 257,54	6,1	0,51±0,05	4,2±1,7
Al <sup>+</sup> 263,16	2	0,25±0,02	6,3±2,5

Теория штарковского уширения с большой точностью (~5%) описывает водородные и водородоподобные линии, однако для легких элементов эта теория допускает ошибки, достигающие 30% [13]. В описываемом эксперименте основным источником ошибок является неточность измерения ширины линий, которая равна ~10%. Не учтены также дополнительные механизмы уширения, обусловленные давлением нейтральных частип, так называемые резонансное (дипольное взаимодействие) и нерезонансное (силами Ван дер Ваальса) уширения. В нашем случае скорость расширения плазмы ~10<sup>6</sup> см/с и, следовательно, доплеровское уширение ~ 0,01 нм, которое в 30+60 раз меньше штарковского уширения. Учитывая все возможные источники ошибок, можно заключить, что измерение концентрации электронов проведено с точностью ~ 40%.

Приведенные выше результаты касаются излучения, испускаемого всей лазерной плазмой. Применяя пространственную щель шириной 100 мкм, параллельную входной щели монохроматора, удалось изучить отдельные участки расширяющейся плазмы. Как отмечается в работе [12], вблизи поверхности мишени в спектре излучения преобладает континуум, следовательно, для увеличения отношения сигнал/шум целесообразно измерять штарковские профили линий на расстоянии > 0,5 мм от поверхности мишени. При повторном измерении полуширин с применением экранирующей щели, позволяющей регистрировать излучение с участка плазмы на расстоянии 1 мм от мишени, были получены те же результаты. Однако при удалении от мишени ширины линий постепенно уменышаются и уже на растояниях > 5 мм аппаратное уширение перекрывает истинные ширины линий. Таким образом, на расстояниях < 5 мм от поверхности мишени эффективная плотность электронов ≥ 10<sup>17</sup> см<sup>-3</sup>. По мере удаления от поверхности мишени N. уменышается. Аналогичное поведение N. наблюдалось и в углеродной плазме.

Таким образом, в статье приведены результаты исследования спектров углеродной и алюминиевой лазерной плазмы. Доказано существование ЛТР для линий  $C^{3+} 253$  нм и  $C^{2+} 229,7$  нм, и с учетом трехчастичной рекомбинации найдена зависимость I'/I = f(T) при  $N_e \ge 10^{17}$  см<sup>-3</sup>, позволяющая экспериментально определить  $T_e$  в лазерной плазме. Данный метод применен также для определения электронной температуры алюминиевой лазерной плазмы. Для измерения концентрации электронов было использовано штарковское уширение линий Al и Al<sup>+</sup> в лазерной плазме. Удовлетворительное совпадение значений  $N_e$ , найденных с помощью семи линий, подтверждает адекватность теории уширения Грима (электронное ударное уширение) [13] и достоверность расчетных значений электронного уширения линий в лазерной плазме. С помощью экранирующей щели найден размер горячей области лазерной плазмы, где  $N_e \ge 10^{17}$  см<sup>-3</sup>. Апробированные в данной работе методы диагностики лазерной плазмы в дальнейшем будут применены для мишеней, изготовленных из новых перспективных молекулярных соединений.

Работа выполнена благодаря финансовой поддержке программы CRDF Cooperative Grants Program, грант №АЕ2-372.

### ЛИТЕРАТУРА

- 1. Г.Ц.Нерсисян, В.О.Папанян, М.В.Симонян. Оптика и спектроскопия, 80, №4, 627 (1996).
- M.Richardson, W.Silfast, H.A.Bender, A.Hanzo, V.P.Yanovsky, F.Jin, and J.Thorpe. Applied Optics, 32, №32, 6901 (1993).
- C.Wulker, W.Theobold, D.R.Gnass, F.P.Schafer, J.S.Bakos, R.Sauerbrey, S.P.Gordon, and R.W.Falcone. Appl. Phys. Lett., 68, 4, 1338 (1996).
- 4. T.Ditmire, J.W.G.Tisch, E.Springate, M.B.Mason, N.Hay, R.A.Smith. J.Maranges, and H.R.Hutchinson. Nature, 386, 6, 54 (1997).
- 5. C.Wulker, W.Theobold, D.Ouw, F.P.Schafer, B.N.Chichkov. Optics Comm., 112, 11, 21 (1994).
- A.McPherson, T.S.Luk, B.D.Thomson, K.Boyer, C.K.Rhodes. Appl. Phys. B, 57, №5, 337 (1993).
- 7. C.H.Nam, W.Tighe, E.Valeo, and S.Suchewer. Appl. Phys. B, 50, Ne4, 275 (1990).
- Г.Ц. Нерсисян, К.Р.Мирзоян, В.О.Папанян. Известия НАН Армении, Физика, 28, №4-6, 140 (1993).
- 9. Г.Грим. Спектроскопия плазмы. М., Атомиздат, 1969.
- 10. D.Colombat, G.F.Tonon. J. Appl. Phys., 44, Ne8, 3524 (1973).
- 11. J.T.Knudtson, W.B.Green, and D.G.Sutton. J. Appl. Phys., 6, №10, 4771 (1987).
- 12. E.Irons. J. Phys. B: Atom. Molec. Phys., 6, No8, 1562 (1973).
- 13. Г.Грим. Уширение спектральных линий в плазме. М., Мир, 1978.

#### CARBON AND ALUMINIUM LASER PLASMAS DIAGNOSTICS IN THE VUV SPECTRAL RANGE

#### G. TS. NERSISYAN, V. O. PAPANYAN, K.M. POKHSRARYAN

The VUV radiation of the laser plasmas formed in the focus of a moderate power YAG:Nd laser on carbon and aluminium targets is studied. Diagnostics of the plasmas is possible due to experimentally shown existence of the local thermodynamic equilibrium. The electron temperature is obtained by measuring the intensity ratios of ionic lines. The electron concentration is measured utilizing the Stark broadening of aluminium lines. Mean electron density of more than 10<sup>17</sup> cm<sup>-3</sup> was measured in the hot plasmas region which elongates up to 5 mm distance from the target surface.

Известия НАН Армении, Физика, т.34, №2, с.87-91 (1999)

УДК 621.382

# МЕЖЗОННОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА В ТОНКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПЛЕНКАХ С УЗКОЙ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНОЙ В СКРЕЩЕННЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ И МАГНИТНОМ ПОЛЯХ

# А. А. АВЕТИСЯН<sup>1</sup>, А. П. ДЖОТЯН<sup>1</sup>, Б. Г. ПОГОСЯН<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ереванский государственный университет

<sup>2</sup>Гюмрийский педагогический институт

(Поступила в редакцию 15 августа 1998 г.)

Исследовано межзонное поглощение света в тонкой размерноквантованной полупроводниковой пленке типа  $A^3B^5$  с непараболичным законом дисперсии в скрещенных электрическом и магнитном полях. С учетом зависимости сдвига центров осцилляторов от волнового числа проанализирован ход спектральных характеристик от напряженности электрического поля.

В настоящее время продолжает расти интерес к детекторам ИКизлучения, работающим в диапазоне 3-5 мкм и 8-14 мкм [1-3]. С этой точки зрения перспективными представляются актуальные объекты современной микроэлектронники – тонкие полупроводниковые пленки с узкой запрещенной зоной. Будучи помещенными в скрещенные электрическое и магнитное поля, такие пленки могут служить полихроматическим детектором ИК-излучения с плавным электрическим управлением [4].

В связи с этим в настоящей работе исследуется межзонное поглощение света в тонкой размерно-квантованной полупроводниковой пленке  $A^{3}B^{5}$  с непараболичным законом дисперсии носителей заряда в скрещенных электрическом Е и магнитном Н полях. При наличии последних приближение эффективной массы справедливо для узкощелевых полупроводников  $A^{3}B^{5}$  при  $E \ll 10^{4}$  B/см (при T = 300 K) и  $H \leq 10^{4}$  Э [5,6].

Для таких полупроводников, в частности для InSb, хорошо оправдано двухзонное приближение [6], в котором закон дисперсии носителей заряда аналогичен релятивистскому с заменой скорости света на параметр непараболичности s ( $s \approx 10^8$  см/с); в этом приближении эффективные массы носителей заряда в соответствующих зонах равны:  $m_c = m_y = m$  [5].

Пусть магнитное поле Н направлено по оси ОZ перпендикулярно поверхности пленки с толщиной L, а электрическое Е – по оси ОХ. В относительно слабых электрических полях, при значениях параметра  $\beta = cE/sH < 1$ , движение носителей заряда все еще носит "магнитный"

характер с ларморовской частотой  $\omega = \omega_0 \sqrt{1 - \beta^2}$ , где  $\omega_0 = eH/mc$  [6].

Используя модель бесконечно глубокой ямы для пленочного потенциала и предполагая сохранение в пленке двумерной зонной структуры, для полной волновой функции носителей заряда в зоне проводимости, при наличии скрещенных полей Е⊥H(A = (0, Hx, 0)), из решения уравнения Клейна-Гордона находим (аналогично для Ψ, (r)) [6]:

$$\Psi_{c}(\mathbf{r}) = \left[\frac{2}{L}\frac{\varepsilon_{g}/2}{E_{c0} + \varepsilon_{g}/2}\right]^{1/2} e^{ik_{y}} \varphi_{N}(x - x_{c}) \sin\frac{\pi n z}{L} U_{c}(\rho), \qquad (1)$$

где  $E_{c0}$  – энергия в зоне проводимости при  $k_y = 0$ ,  $U_{c,v}(\rho)$  – блоховская амплитуда в соответствующих двумерных зонах, а

$$\varphi_n(x-x_c) = \{2^N N! \pi^{1/2} \lambda\}^{-1/2} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x-x_c}{\lambda}\right)^2} H_N\left(\frac{x-x_c}{\lambda}\right)$$
(2)

– осцилляторная функция,  $H_N(x)$  – полином Эрмита,  $\lambda = (\hbar/m\omega)^{1/2}$  – магнитная длина:  $\lambda \approx \lambda_0 = (c\hbar/eH)^{1/2}$  при  $\beta < 1$ .

Для энергетического спектра носителей заряда находим

$$E_{\varepsilon} = -\frac{\varepsilon_{g}}{2} - \beta \hbar s k_{y} + \sqrt{\frac{\varepsilon_{g}}{4} + \varepsilon_{g} (2N+1) \mu H (1-\beta^{2})^{1/2} + \varepsilon_{g} \frac{\hbar^{2} \pi^{2} n^{2}}{2mL^{2}}} (1-\beta^{2})^{1/2};$$

$$E_{\nu} = -\frac{\varepsilon_{g}}{2} - \beta \hbar s k_{y}' - \sqrt{\frac{\varepsilon_{g}}{4} + \varepsilon_{g} (2N'+1) \mu H (1-\beta^{2})^{1/2} + \varepsilon_{g} \frac{\hbar^{2} \pi^{2} n^{2}}{2mL^{2}}} (1-\beta^{2})^{1/2},$$
(3)

где  $\mu = e\hbar/2mc$  – эффективный магнетон Бора, *n*, *n'* – номера пленочных уровней, а *N*, *N'* – уровней Ландау в соответствующих зонах: *n*, *n'* = 1,2,3,..., *N*, *N'* = 0,1,2,3,....

Как и в [6], положения центров осцилляторов в зонах определяются выражениями:

$$x_{c} = -\frac{\lambda_{0}^{2}}{1-\beta^{2}}k_{y} - \frac{eE}{ms^{2}}\varepsilon_{c}\frac{\lambda_{0}^{2}}{\hbar\omega_{0}(1-\beta^{2})},$$

$$x_{v} = -\frac{\lambda_{0}^{2}}{1-\beta^{2}}k_{y}' + \frac{eE}{ms^{2}}(\varepsilon_{v} + \varepsilon_{g})\frac{\lambda_{0}^{2}}{\hbar\omega_{0}(1-\beta^{2})},$$
(4)

где  $\varepsilon_{c,v} = E_{c,v} + \frac{\varepsilon_g}{2}$ .

Пусть, для простоты, свет падает на пленку по оси ОZ (q – импульс фотона,  $q = q_z$ ). Для матричного элемента межзонного перехода между состояниями  $\Psi_c(\mathbf{r})$  и  $\Psi_v(\mathbf{r})$ , описываемыми (1), получаем

$$P_{vc} = C_c C_v \frac{eA_0}{m_0 c} (ep_{cv}(0)) \delta_{k_j k'_j} F_{n'}^n(q_z L) \times I, \qquad (5)$$

где  $C_{c,v} = \sqrt{\frac{\varepsilon_g/2}{E_{c,v,0} + \varepsilon_g/2}}$ , вид функции  $F_{n'}^n(q_z L)$  найден в [7],

$$\mathbf{p}_{cv}(\boldsymbol{\chi}) = -i\hbar \frac{1}{S_0} \int U_{c\boldsymbol{\chi}}^*(\rho) \nabla U_{v\boldsymbol{\chi}}(\rho) d\rho, \qquad (6)$$

думерный волновой вектор в плоскости пленки, S<sub>0</sub> – площадь
 элементарной ячейки на поверхности пленки, а

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_N (x - x_c) \varphi_{N'} (x - x_v) dx$$
<sup>(7)</sup>

- интеграл перекрытия осцилляторных функций. Из-за смещения центров осцилляторов в разные стороны в электрическом поле  $I \neq 0$  и при  $N \neq N'$  [6,8].

При кейновском законе дисперсии для величины  $\gamma = (x_v - x_e)/2\lambda$ , характеризующей смещения центров осцилляторов, из (4) с учетом (3) получаем

$$\gamma = \gamma_0 \frac{1 - \beta \lambda_s k_y}{(1 - \beta^2)^{3/4}},$$
(8)

где  $\gamma_0 = \frac{m_c + m_v}{2\hbar H} c\lambda_0 E$  – постоянный сдвиг для стандартного полупроводника,  $\lambda_s = \frac{\hbar}{m_s}$  – аналог комптоновской длины волны в кейновском полупроводнике.

Коэффициент межзонного поглощения  $\alpha^{E/H}(\omega)$  в тонкой пленке имеет вид:

$$\alpha^{E/H}(\omega) = \frac{2\pi}{N_0 \nu \hbar} \sum_{Nn, N'n'} \int |P_{\nu c}|^2 \delta(\hbar \omega - E_c + E_{\nu}) \frac{2}{2\pi} dk_{\nu}, \qquad (9)$$

где N<sub>0</sub> – плотность числа фотонов, v – скорость света в полупроводнике.

Используя выражение (5) для Р<sub>ис</sub>, из (9) находим:

$$\alpha^{E/H}(\omega) = \frac{2m^2 s^4}{N_0 v \hbar} |\mathbf{ep}_{cv}(0)|^2 \left(\frac{eA_0}{m_0 c}\right)^2 \sum_{Nn, N'n'} |F_{n'}^n|^2 \frac{\delta(\Delta_{Nn} + \Delta_{N'n'} - \hbar\omega)}{\Delta_{N'n'} \Delta_{Nn}} \times \frac{2^N N'!}{2^{N'} N'!} \int [L_{n'}^{N-N'} (2\gamma^2)]^2 e^{-2\gamma^2} \gamma^{2(N-N')} dk_y, \qquad (10)$$

где

$$\Delta_{Nn} = \sqrt{\frac{\varepsilon_g^2}{4} + \varepsilon_g (2N+1)\mu H (1-\beta^2)^{1/2} + \varepsilon_g \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} (1-\beta^2)^{1/2}},$$

$$\Delta_{Nn'} = \sqrt{\frac{\varepsilon_g^2}{4} + \varepsilon_g (2N''+1)\mu H (1-\beta^2)^{1/2} + \varepsilon_g \frac{\hbar^2 \pi^2 n'^2}{2mL^2} (1-\beta^2)^{1/2}}.$$
(11)

Как и в [6], выражение для  $\alpha^{E/H}(\omega)$  в случае непараболичного закона дисперсии можно получить, проинтегрировав по  $k_y$  многочлен в (10), возникающий от квадрата полинома Лагерра. В случае стандартного закона дисперсии такой ситуации не возникает, поскольку аргумент полинома Лагерра от  $k_y$  не зависит [8].

При n = n' = 1, N = N' = 0 величина  $2\Delta_{Nn}$  играет роль эффективной запрещенной зоны  $\varepsilon_g^*$ , определяющей в тонкой пленке новый край поглошения

$$\varepsilon_{g}^{*} = \left(\varepsilon_{g}^{2} + 8ms^{2}\mu H(1-\beta^{2})^{1/2} + \frac{4\pi^{2}\hbar^{2}s^{2}}{L^{2}}\right)^{1/2}\sqrt{1-\beta^{2}},$$
 (12)

нелинейно зависящий от E и H. При  $E \rightarrow 0$  выражение (12) переходит в аналогичное для края поглощения в тонкой пленке  $A^3B^5$  в магнитном поле [9]. Изменяя величину E при фиксированных L и H, можно легко регулировать положение края поглощения.

Для тонких пленок, как и в [9], спектр поглощения формируется из дискретных линий, соответствующих переходам с одного магнетопленочного уровня n', N' в валентной зоне на другой – N, n в зоне проводимости. Благодаря малым значениям эффективных масс в узкощелевых полупроводниках (например, в InSb) может быть достигнута существенная перестройка-магнетопленочных уровней путем малых изменений L и H.

При  $L \approx 500$  Å и  $H = 10^4$  Э тонкую структуру спектра определяют переходы между "магнитными" уровнями, "привязанными" к пленочным [9], однако при наличии Е становятся возможными переходы между уровнями с любыми N, N'. Интенсивность конкретного перехода

 $(n'N') \rightarrow (nN)$  определяется множителем  $\frac{|F_{n'}^n|^2}{\Delta_{Nn'}\Delta_{Nn}}I_{NN'}(\beta)$ , где

$$I_{NN'}(\beta) = \frac{2^N N'!}{2^{N'} N'!} \int [L_{n'}^{N-N'}(2\gamma^2)]^2 e^{-2\gamma^2} \gamma^{2(N-N')} dk_y.$$

Графические зависимости  $I_{NN'}(\beta)$  для разрешенных и запрещенных переходов, полученные в результате численного интегрирования, приведены в работе [6].

С увеличением электрического поля как край поглощения, так и все максимумы кривой поглощения сдвигаются в длинноволновую область. При этом происходит плавная перестройка спектральной кривой: разрешенные при E = 0 максимумы, соответствующие переходам с равными N, гасятся и возникают новые, ранее запрещенные  $(N \neq N')$ . Наиболее медленно с ростом E спадает интенсивность основного пика, соответствующего переходу  $(1,0) \rightarrow (1,0)$ ; при  $L \approx 500$  Å и  $H = 10^4$  Э максимум его при E = 0 приходится на длину волны  $\lambda \approx 4,78$  мкм.

В заключение выражаем благодарность Э.М.Казаряну за плодотворные обсуждения.

#### ЛИТЕРАТУРА

- В.М.Арутюнян, А.Т.Дарбасян. Полупроводниковая микроэлектроника, материалы 2-ой Национальной конференции, Дилижан, 1998, с.137.
- Chiang Jung-Chi, S.Li Shang, M.Z.Tidrow, P.Ho, M.Tsai, C.P.Lee. Phys. Lett., 69, 2412 (1996).
- G.V.Churakov, Yu.L.Ivanov, V.M.Ustinov, et al. Solid State Electronics, 40, 391 (1996).
- 4. А.Е.Ржанов, С.Д.Лазарев и др. Микроэлектроника, 9, 79 (1980).
- 5. И.М.Цидильковский. Зонная структура полупроводников. М., Наука, 1978.
- А.А.Аветисян, Б.Г.Погосян, А.П.Джотян. Известия НАН Армении, Физика, 33, 296 (1998).
- 7. В.Г.Коган, В.З.Кресин. ФТТ, 11, 3230 (1969).
- 8. А.Г.Аронов, Г.Е.Пикус. ЖЭТФ, 51, 505 (1966).
- А.П.Джотян, Э.М.Казарян, Ю.В.Каракашян, А.С.Чиркинян. Известия НАН Армении, Физика, 29, 67 (1994).

# ԼՈՒՅՄԻ ՄԻՋԳՈՏԻԱԿԱՆ ԿԼԱՆՈՒՄԸ ՆԵՂ ԱՐԳԵԼՎԱԾ ԳՈՏԻՈՎ ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴՉԱՅԻՆ ԹԱՂԱՆԹՆԵՐՈՒՄ ԽԱՉՎԱԾ ԷԼԵԿՏՐԱԿԱՆ ԵՎ ՄԱԳՆԻՍԱԿԱՆ ԴԱՇՏԵՐՈՒՄ

#### Ա.Ա.ԱՎԵՏԻՍՅԱՆ, Ա. Պ. ՋՈԹՅԱՆ, Բ. Ժ. ՊՈՂՈՍՅԱՆ

Հետազոտված է լույսի միջգոտիական կլանումը չափային քվանտացված A<sup>3</sup>B<sup>5</sup> տիպի ոչ պարաբոլային դիսպերսիայով բարակ կիսահաղորդչային թաղանթներում՝ խաչված էլեկտրական և մագնիսական դաշտերում։ Հաշվի առնելով օսցիլյատորների կենտրոնների շեղման կախվածությունը ալիքային թվից, հետազոտված է սպեկտրալ բնութագրերի վարքը էլեկտրական դաշտում։

### INTERBAND ABSORPTION OF LIGHT IN THIN FILMS OF SEMICONDUCTORS WITH A NARROW FOBIDDEN BAND IN CROSSED ELECTRIC AND MAGNETIC FIELDS

#### A. A. AVETISYAN, A. P. DJOTYAN, B. G. POGHOSYAN

Interband light absorption in a thin size-quantised semiconductor film of  $A^3B^5$  type with a nonparabolic law of dispersion in crossed electric and magnetic fields is investigated. Taking into account the dependence of the oscillators centers shift on the wave number, the shape change of spectral characteristics depending on the electric field, is analyzed. Известия НАН Армении, Физика, т.34, №2, с.92-97 (1999)

УДК 621.315.592

# РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНА НА ОГРАНИЧЕННЫХ И ИНТЕРФЕЙСНЫХ ПО-ФОНОНАХ В КВАНТОВЫХ ПРОВОЛОКАХ

#### А. Л. АСАТРЯН

# Ереванский государственный университет

# (Поступила в редакцию 15 декабря 1998 г.)

Рассмотрено рассеяние электрона в цилиндрической квантовой проволоке в диэлектрической среде с учетом влияния пространственного ограничения на фононный спектр. В борновском приближении получено выражение для темпа рассеяния электрона на ограниченных и интерфейсных ПО-фононах с учетом межподзонных переходов. Выявлены области доминирования различных фононных мод, а также области существенного влияния фононного ограничения на темп внутриподзонного рассеяния.

#### 1. Введение

В современной нано- и оптоэлектронике широко применяются низкоразмерные полупроводниковые структуры на основе соединений типа A<sup>3</sup>B<sup>5</sup>, в которых, уже в области температур порядка нескольких десятков К, полярные оптические (ПО) фононы играют решающую роль в формировании кинетических и оптических свойств.

В теории низкоразмерных полупроводниковых структур до недавнего времени не принималось во внимание влияние пространственного ограничения на спектр ПО-фононов. Однако, после экспериментального обнаружения ПО-ограниченных [1] и интерфейсных [2] фононных мод в квантовых полупроводниковых проволоках GaAs, в ряде работ были развиты макроскопические [3-10] и микроскопические [11-14] теории этих мод для проволок с различными формами сечения. Макроскопические теории основываются либо на модели диэлектрического континуума [3,4,7-10], либо на гидродинамической модели [5,8]. Следует заметить, что согласно [10,15] результаты макроскопических и микроскопических теорий существенно не отличаются.

На основе модели диэлектрического континуума в [7-9] получены гамильтонианы взаимодействия электрона как с ограниченными, так и с интерфейсными фононами в цилиндрических квантовых проволоках. Следует, однако, заметить, что в случае интерфейсных фононов приведенные в [7-9] выражения для гамильтонианов существенно отличаются друг от друга, что является следствием некорректного нормирования волновых функций фононных мод. В данной работе проведен сравнительный анализ вкладов ограниченных и интерфейсных фононов в темп рассеяния электрона как при внутриподзонном, так и при межподзонном рассеянии. Расчеты проведены на основании гамильтониана, полученного нами с помощью исправленного условия нормирования фононных мод, совпадающего с приведенным в [16] аналогичным условием. Выявлены также условия применимости предположения о трехмерности полярных LO-фононов при электрон-фононном взаимодействии.

#### Гамильтонианы электрон-фононного взаимодействия и темп рассеяния электрона

Рассмотрим квантовую проволоку с круглым сечением радиуса *R* в диэлектрической среде. В приближении бесконечно глубокой потенциальной ямы волновая функция и энергетический спектр электрона имеют вид:

$$\psi_{snk}(r,\varphi,z) = \frac{1}{\sqrt{V}J_{n+1}(\lambda_s^n)} J_n\left(\lambda_s^n \frac{r}{R}\right) e^{in\varphi} e^{ikz}, \qquad (1)$$

$$E_{snk} = E_{sn} + E, \quad E_{sn} = \frac{\hbar^2 (\lambda_s^n)^2}{2mR^2}, \qquad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m},$$
 (2)

где  $s = 1, 2, ...; n = 0, \pm 1, \pm 2, -$  квантовые числа, V – объем проволоки, k – волновое число свободного движения электрона вдоль оси проволоки,  $J_n(x)$  – функция Бесселя первого рода,  $\lambda_s^n$  – ее нули, m – эффективная масса электрона.

Взаимодействие электрона с ограниченными LO- (j = 1) и интерфейсными (j = 2) ПО-фононами описывается фрелиховским гамильтонианом

$$H_F = \sum_{\sigma,j} \left\{ \Gamma_{\sigma}^{(j)} e^{iqz} e^{ip\varphi} a_{\sigma}^{(j)} + \Gamma_{\sigma}^{(j)^*} e^{-iqz} e^{-ip\varphi} a_{\sigma}^{(j)^*} \right\},\tag{3}$$

где фурье-коэффициенты электрон-ПО-фононного взаимодействия даются следующими выражениями [7,9]:

$$\Gamma_{\sigma}^{(1)} = \left[\frac{2\pi e^2 \hbar \omega_{\sigma}^{(1)}}{V} \cdot \frac{(\varepsilon_{\infty 1}^{-1} - \varepsilon_{s1}^{-1})}{J_{p+1}^2 (\lambda_l^p) (q^2 + \lambda_l^p R^{-2})}\right]^{1/2} J_p\left(\lambda_l^p \frac{r}{R}\right), \tag{4}$$

$$\Gamma_{\sigma}^{(2)} = \left[\frac{2\pi e^2 \hbar R}{qV} \cdot \frac{1}{I_p(qR)I_p'(qR)} D(\omega_{\sigma}^{(2)})\right]^{1/2} I_p(qr), \tag{5}$$

где

$$D(\omega) = \frac{\varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_2(\omega)\frac{\partial\varepsilon_1}{\partial\omega} - \varepsilon_1(\omega)\frac{\partial\varepsilon_2}{\partial\omega}},$$
(6)

 $a_{\sigma}^{(j)}(a_{\sigma}^{(j)^{+}})$  – оператор уничтожения (рождения) фонона *j*-го типа с набором квантовых чисел  $\sigma = (q, p, l) \omega_{\sigma}^{(j)}$  – частоты фононных мод [7],  $I_{p}(x)$  – модифицированная функци Бесселя порядка *p*. Зависящая от частоты диэлектрическая функция дается выражением

$$\varepsilon_i(\omega) = \varepsilon_{\infty i} \frac{\omega_{Li}^2 - \omega^2}{\omega_{Ti}^2 - \omega^2},\tag{7}$$

где  $\varepsilon_{si}$ ,  $\varepsilon_{\infty i}$  – статическая и высокочастотная диэлектрические постоянные проволоки (i = 1) и окружающей среды (i = 2) соответственно,  $\omega_{Li} (\omega_{Tl})$  – частота объемных продольных (поперечных) оптических фононов. Полученное нами выражение (5) для  $\Gamma_{\sigma}^{(2)}$  соответствует правильному условию нормирования фононных мод ([16], выражение (17)).

В борновском приближении для темпа рассеяния электрона при взаимодействии с ограниченными LO-фононами получено следующее выражение:

$$(\tau_{e(a)}^{-1})_{conf} = \frac{4\hbar}{mR^2} \left(\frac{\hbar\omega_{L1}}{E}\right)^{3/2} \alpha \cdot \left(N(\omega_{L1}) + \frac{1}{2} + \beta \frac{1}{2}\right) \cdot \sum_{n's'l} \frac{P_{nn'}^{ss'l}}{\gamma} \times \left\{\frac{1}{(1-\gamma)^2 + \frac{E_{l(n-n')}}{E}} + \frac{1}{(1+\gamma)^2 + \frac{E_{l(n-n')}}{E}}\right\},$$
(8)

где  $\alpha = \frac{e^2}{2\hbar\omega_{L1}} \left(\frac{2m\omega_{L1}}{\hbar}\right)^{1/2} \left(\frac{1}{\varepsilon_{\infty 1}} - \frac{1}{\varepsilon_{s1}}\right)$  – постоянная электрон-фононной

связи,

$$P_{nn'}^{ss'l} = \frac{\left| \int_{0}^{1} J_n(\lambda_s^n x) J_{n'}(\lambda_{s'}^{n'} x) J_{(n-n')}(\lambda_1^{(n-n')} x) x dx \right|^2}{J_{n+1}^2(\lambda_s^n) J_{n'+1}^2(\lambda_s^{n'}) J_{(n-n')+1}^2(\lambda_1^{(n-n')})},$$
(9)

$$\gamma = \sqrt{1 - \frac{E_{mn'}^{ss'} + \beta \hbar \omega_{1L}}{E}}, \qquad (10)$$

 $E_{nn'}^{ss'} = E_{s'n'} - E_{sn}$ , индексы "e" и "a" у  $\tau^{-1}$  означают акт рассеяния соответственно с испусканием ( $\beta = 1$ ) и поглощением ( $\beta = -1$ ) фонона,  $N(\omega)$  – функция распределения Бозе-Эйнштейна. В (8) положено  $\omega_{\sigma}^{(1)} = \omega_{L1}$ .

Для темпа рассеяния электрона при взаимодействии с интерфейсными ПО-фононами получено следующее выражение:

$$(\tau_{a(a)}^{-1})_{\text{int}} = \sum_{n's'l} W_l^{(n-n')} \left( N(\omega_{(l,|n-n'|,0)}) + \frac{1}{2} + \beta \frac{1}{2} \right) \cdot \frac{1}{\gamma_l} \cdot \left\{ \frac{P_{mn'-}^{as'l}}{|l-\gamma_l|} + \frac{P_{nn'+}^{as'l}}{|l+\gamma_l|} \right\}, \quad (11)$$

где

$$W_l^{(|n-n'|)} = \frac{4e^2}{RE} D(\omega_{(l,n-n'),0}^{(2)}), \qquad (12)$$

$$P_{nn'\pm}^{zz'l} = \frac{1}{J_{n+1}^{2}(\lambda_{s}^{n})J_{n'+1}^{2}(\lambda_{s}^{n'})} \cdot \frac{\left| \int_{0}^{1} J_{n}(\lambda_{s}^{n}x)J_{n'}(\lambda_{s}^{n'}x)I_{(n-n')}\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}R(1\pm\gamma_{l})x\right) dx \right|^{2}}{I_{(n-n')}\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}R(1\pm\gamma_{l})\right) I_{(n-n')}'\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}R(1\pm\gamma_{l})\right)}.$$
(13)

 $\gamma_l$  дается формулой (10), в которой частота  $\omega_{L1}$  заменена на  $\omega_{(l,\mu-n'|,0}$ . Следует заметить, что учет дисперсии интерфейсных фононов при расчете темпа рассеяния существенно не влияет на результаты ([17]).

#### 3. Обсуждение результатов

Формулы (8) и (11) позволяют вычислить темп рассеяния электрона как в случае внутриподзонных, так и межподзонных переходов.

При внутриподзонном рассеянии (n = n' = 0, s = s' = 1) из формулы (8) следует выражение, отличающееся от приведенной в [9] соответствующей формулы численным коэффициентом 1/2, обусловленным различием в нормировании фононных мод.

Сингулярности в  $\tau^{-1}$  при энергиях  $E_0 \equiv E_{nn'}^{ss'} + \hbar \omega_{\sigma}^{(J)}$  обусловлены поведением одномерной функции плотности состояний. Когда  $E > E_0$ , процессы с испусканием фононов преобладают над процессами с по-глощением фононов.

При внутриподзонном рассеянии на ограниченных LO-фононах доминируют моды с дискретным квантовым числом l = 1, так как при  $l \ge 2 P_{00}^{11l} < 0.08 P_{00}^{111}$ . В квантовой проволоке GaAs, находящейся в диэлектрической среде AlAs, частота высокоэнергетической интерфейсной фононной моды (l = 1, т.н. AlAs-подобная мода) мало (всего на 2.6 мэВ) отличается от  $\omega_{L2}$ , а частота низкоэнергетической интерфейсной ной фононной моды (l = 2, т.н. GaAs-подобная мода) – от  $\omega_{T1}$  (1.4 мэВ). При рассеянии на интерфейсных фононах доминирует AlAs-подобная мода, поскольку при значениях  $qR < 1 W_1^{(0)}/W_2^{(0)} > 10$ . Здесь и далее параметры материалов взяты из статьи [18].

На рис.1 представлены зависимости темпа рассеяния от энергии электрона E при взаимодействии с ограниченными (а) и интерфейсными (б) фононами с учетом межподзонных переходов для квантовой проволоки GaAs. Следует отметить, что вклады межподзонных переходов в темп рассеяния электрона существенны только в некоторой области E, прилетающей к  $E_0$ . Так, вклад ограниченных фононов в темп рассеяния с учетом только переходов (0,1)-(1,1) превышает 50% значения темпа рассеяния лишь в области энергий шириной 70 мэВ. Для интерфейсных фононов этот вклад превышает 5% лишь в узкой области энергий шириной 10 мэВ.



Рис.1. График зависимости  $\tau^{-1}(E)$  при межподзонном рассеянии на ограниченных (а) и интерфейсных (б) фононах для проволоки GaAs, находящейся в AlAs (R = 50 Å, T = 300 K). Сплошная линия соответствует испусканию, пунктирная - поглощению фонона.

На рис.2 представлены области доминирования интерфейсных (затемненные области) и ограниченных фононных мод при внутриподзонном рассеянии на ( R, E )-плоскости. Ограничивающие эти области кривые найдены с помощью графического решения уравнения



 $\left(\tau_{e}^{-1}(R,E)+\tau_{a}^{-1}(R,E)\right)_{int}/\left(\tau_{e}^{-1}(R,E)+\tau_{a}^{-1}(R,E)\right)_{conf}=1.$ 

Рис.2. Области доминирования интерфейсных (затемненные области) и ограниченных фононных мод при внутриподзонном рассеянии на (R, E)-плоскости.

В областях  $E < \hbar \omega_{T1}$ , где имеют место только процессы с поглощением фонона, и  $\hbar \omega_{L1} < E < \hbar \omega_{L2}$  рассеяние на ограниченных фононах доминирует практически при всех значениях R. В областях  $\hbar \omega_{T1} < E < \hbar \omega_{L1}$  и  $E > \hbar \omega_{L2}$  для проволок с радиусом R < 50Å доминирует интерфейсное рассеяние. Последняя область медленно расширяется с увеличением Е.

заключение выражаю благодарность А.А.Киракосяну B и А.Л.Вартаняну за полезные обсуждения результатов.

Данное исследование выполнено при частичной поддержке гранта CRDF (проект №375100).

#### ЛИТЕРАТУРА

- M.Watt, C.M.Sotomayor Torres, H.E.G.Arnot, S.P.Beaumont. Semicond. Sci. Technol., 5, 285 (1990).
- 2. G.Fasol, M.Tanaka, H.Sakaki, Y.Horikoshi. Phys. Rev. B, 38, 6056 (1988).
- 3. M.A.Stroscio. Phys. Rev. B, 40, 6428 (1989).
- 4. M.A.Stroscio, K.W.Kim, A.Littlejohn, H.Chuang. Phys. Rcv. B, 42, 1488 (1990).
- 5. N.C.Constantinou, B.K.Ridley. Phys. Rev. B, 41, 10627 (1990).
- 6. P.A. Knipp, T.L.Reinecke. Phys. Rev. B, 45, 9091 (1992).
- 7. R.Enderlein. Phys. Rev. B, 47, 2162 (1993).
- 8. X.F.Wang, X.L.Lei. Phys. Rev. B, 49, 4780 (1994).
- C.R.Bennett, N.C.Constantinou, M.Babiker, B.K.Ridley. J. Phys.: Condens. Matter, 7, 9819 (1995).
- 10. P.A.Knipp, T.L.Reinecke. Phys. Rev. B, 48, 18037 (1993).
- 11. S.F.Ren, Y.C.Chang. Phys. Rev. B, 43, 11857 (1991).
- 12. B.F.Zhu. Sci. Technol. B, 7, 88 (1992).
- 13. H.Rücker, E.Molinari, P.Lugli. Phys. Rev. B, 44, 3463 (1991).
- 14. H.Rücker, E.Molinari, P.Lugli. Phys. Rev. B, 45, 6747 (1992).
- 15. F.Rossi, L.Rota, C.Bungaro, P.Lugli, E.Molinari, Phys. Rev. B, 47, 1695 (1993).
- S.Yu, K.W.Kim, M.A.Stroscio, G.J.Iafrate, J.-P.Sun, G.I.Haddad. J. Appl. Phys., 82, 3363 (1997).
- 17. А.Л.Вартанян, А.Л.Асатрян. Тезисы докладов III всероссийской конференции по физике полупроводников, Москва, 1997, с.66.
- 18. S.Adachi. J. Appl. Phys., 58, R1 (1985).
- 19. N.C.Constantinou, B.K.Ridley. J. Phys.: Condens. Matter, 1, 2283 (1989).

#### ԷԼԵԿՏՐՈՆԻ ՅՐՈՒՄԸ ՄԱՀՄԱՆԱՓԱԿ ԵՎ ՄՒՋՄԱԿԵՐԵՎՈՒԹԱՅԻՆ ԲԵՎԵՌԱՅԻՆ ՕՊՏԻԿԱԿԱՆ ՖՈՆՈՆՆԵՐԻ ՎՐԱ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԼԱՐՈՒՄ

#### U. L. UUUSPBUL

Դիտարկված է էլնկտրոնի ցրումը դիէլնկտրական միջավայրում գտնվող գլանային քվանտային լարում ֆոնոնային սպնկտրի վրա տարածական սահմանափակման ազդեցության հաշվառմամբ։ Բոոնի մոտավորությամբ ստացված է սահմանափակ և միջմակերևութային բնեռային օպտիկական ֆոնոնների վրա էլնկտրոնի ցրման արագության արտահայտություն՝ միջենթագուտիական անցումների հաշվառմամբ։ Ներենթագուտիական անցումների դեպքում գտնված են տարբեր ֆոնոնային մոդերի գերակայության, ինչպես նաև ցրման արագության վրա ֆոնոնային սահմանափակման ազդեցության տիրույթները։

#### SCATTERING OF ELECTRON BY CONFINED AND INTERFACE PO-PHONONS IN QUANTUM WIRES

#### A. L. ASATRIAN

The electron scattering in a cylindrical quantum wire embedded in a dielectric medium is studied taking into account the phonon confinement effect. The expression is obtained for both electron-confined-PO-phonon and electron-interface-PO-phonon intersubband scattering rates within the frame of the Born approximation. The predomination regions of different phonon modes and the phonon confinement influence on the scattering rate for intrasubband transitions are also found. Известия НАН Армении, Физика, т.34, №2, с.98-102 (1999)

УДК 534.29

# ФОРМА МЕССБАУЭРОВСКОГО СПЕКТРА РАССЕЯНИЯ ПРИ МОДУЛЯЦИИ КОГЕРЕНТНЫМ УЛЬТРАЗВУКОМ

# Э. М. АРУТЮНЯН, А. Л. КОЧАРЯН, Л. А. КОЧАРЯН, Г. А. АРУТЮНЯН

Институт прикладных проблем физики НАН Армении

# (Поступила в редакцию 15 октября 1997 г.)

Исследовано влияние когерентности ультразвуковых колебаний на форму мессбауэровского спектра рассеяния. В эксперименте в геометрии обратного рассеяния наблюдался эффект осцилляций интенсивностей компонент модуляционного мессбауэровского спектра. Получено практически зануление интенсивности линии гамма-резонанса, что соответствует когерентности ультразвукового поля в рассеивателе, близкой к 100%.

Исследование явления резонансного взаимодействия гамма-излучения с ядрами твердого тела, подверженного воздействию ультразвуковых колебаний, представляет большой интерес для изучения динамических характеристик ядер в твердом теле и основано на высокой чувствительности мессбауэровской спектроскопии к параметрам акустического воздействия. При ультразвуковой модуляции резонансного гамма-излучения выделяются два предельных случая: когерентный режим возбуждения ядер, когда все ядра колеблются синфазно и с одинаковой амплитудой, и некогерентный режим, когда ядра колеблются с неопределенными фазами и с амплитудами, имеющими релеевское распределение. В работе [1] удалось реализовать в эксперименте когерентный режим возбуждения мессбауэровских ядер поглотителя, что обеспечивает более эффективную модуляцию интенсивности излучения и позволяет исследовать временные и спектральные зависимости при различных степенях модуляции, а также расширяет применение мессбауэровской спектроскопии в различных областях науки и техники.

Большой интерес представляет экспериментальная реализация когерентной модуляции рассеянного мессбауэровского излучения, чему и посвящена настоящая работа. В отличие от экспериментов в геометрии на пропускание, геометрия обратного рассеяния позволяет получить намного большее отношение эффекта к фону, наблюдать гамма-резонансы с вероятностью эффекта ~ 0,5% и проводить угловой и энергетический анализ рассеянного излучения, что дает более богатую информацию о процессе взаимодействия излучения с веществом.

При синусоидальной модулящии атомов рассеивателя с частотой

Ω и амплитудой  $A_0$  в частотно-модулированном спектре рассеянного излучения, кроме основной линии на частоте  $ω_0$ , появляются сателлиты на частотах  $ω_0 \pm n\Omega$  (n = 0, 1, 2, ...). Интенсивности этих линий равны

$$W_n = \int_0^\infty J_n^2 \left(\frac{A_0}{\overline{\lambda}}\right) P(A_0) dA_0 ,$$

где  $J_n(A_0/\overline{\lambda})$  – функция Бесселя *n*-го порядка,  $\overline{\lambda}$  – длина волны гаммаизлучения.

Если функция распределения  $P(A_0) = \delta(A_0 - A)$ , то зависимость  $W_n(a) = J_n^2(a)$  характеризуется осцилляциями интенсивностей основной линии и сателлитов, где  $a = A/\overline{\lambda}$  – индекс модуляции. Это когерентный режим модуляции, при котором осуществляется синфазное и с одинаковой амплитудой колебание атомов рассеивателя. Если же функция

распределения имеет вид релеевского  $P(A_0) = \frac{A_0}{A} \exp\left(-\frac{A_0^2}{2A^2}\right)$ 

 $W_n(a) = I_n(a^2) \exp(-a^2)$ , где  $I_n(a^2)$  – функция Бесселя *n*-го порядка от мнимого аргумента. При n = 0 интенсивность основной линии монотонно убывает при увеличении *a*, и при всех  $a W_{n+1}(a) < W_n(a)$ .

Если не принимать особых мер [1], то в экспериментах обычно реализуется случай частичной когерентности  $W_n = \alpha J_n^2(a) + (1-\alpha) \times X = X_n(a^2)e^{a^2}$ , где  $\alpha$  – степень когерентности.

Основными причинами, из-за которых когерентные колебания трансформируются в некогерентные, являются, как было показано в работе [2], нарушения однородности ультразвукового поля при возбуждении преобразователя, прохождении УЗ волны через акустическую склейку и при возбуждении атомов рассеивателя. Эти нарушения приводят к пространственной неоднородности в распределении амплитуды УЗ колебаний в рассеивателе.

Ниже приводятся результаты наших экспериментов по когерентной модуляции мессбауэровского излучения и наблюдении осцилляции интенсивностей компонент модуляционного спектра в геометрии обратного рассеяния.

В экспериментах была использована специальная акустическая кювета: кольцо из диэлектрика диаметром 30 мм с обеих сторон тщательно полируется. В качестве модулятора использовался однородный по пьезосвойству преобразователь из монокристалла кварца Х-среза диаметром 30 мм и толщиной 220 мкм, который крепился по всему периметру к кольцу с помощью клеевой композиции. Мягкое эластичное закрепление позволяет преобразователю колебаться максимально свободно и однородно по амплитуде. Электрическое напряжение к преобразователю подводится с помощью гибкой металлической струны, припаянной к металлическому электроду, напыленному на поверхность преобразователя. К другой стороне кольца тем же клеем прикрепляется мессбауэровский рассеиватель – фольга из нержавеющей стали толщиной 12 мкм, равномерно натянутая между двумя концентрическими кольцами. В собранную таким образом акустическую кювету через отверстие в кольце заливается обработанный ультразвуком глицерин. С обеих сторон кювета коллимируется свинцовыми диафрагмами, чтобы рабочей являлась центральная часть преобразователя и рассеивателя диаметром 10 мм. Акустическая кювета помещается между мессбауэровским источником и детектором гамма-излучения. Для сравнения параметров мессбауэровских спектров, модулированных когерентным ультразвуком, в геометрии поглощения и обратного рассеяния сначала снимается мессбауэровский спектр поглощения нержавеющей стали в зависимости от напряжения на пьезопреобразователе. Подбором частоты и амплитуды ультразвука добиваемся максимальной однородности по амплитуде колебания атомов поглотителя и осцилляции интенсивностей компонент модуляционного спектра при минимальной интенсивности основной линии спектра.

Затем для получения когерентной модуляции и наблюдения осцилляций интенсивностей компонент модуляционного мессбауэровского спектра в геометрии обратного рассеяния детектор перемещается в положение, в котором он не "видит" мессбауэровский источник, а только "видит" рассеиватель со стороны источника и регистрирует только рассеянное излучение, в которое основной вклад дают ядерное рассеяние без отдачи и релеевское рассеяние. Вклады от других эффектов исключаются подбором большого угла рассеяния и электроникой. Так как релеевское рассеяние в основном направлено вперед, то при наблюдении рассеяния назад его вклад минимален.

В эксперименте используется гамма-излучение от источника Co<sup>57</sup> (E<sub>r</sub> = 14,4 кэВ), которое коллимируется и падает на поверхность рассеивателя. Рассеянное излучение регистрируется сцинтилляционным детектором, расположенным под углом 35° к нормали к поверхности рассеивателя. В детекторе гамма-кванты преобразуются в импульсы напряжения, которые поступают на усилитель и дискриминатор, а затем анализируются многоканальным анализатором, работающим в режиме временного анализа и накопления. В результате получаем мессбауэровский спектр рассеяния нержавеющей стали, в который дают вклад гаммакванты от резонансного рассеяния и релеевского рассеяния. При возбуждении в рассеивателе ультразвуковых колебаний спектр рассеяния изменяется (рис.1): в нем, кроме несмещенной линии, появляются ультразвуковые сателлиты, расположенные симметрично по обе стороны от основной линии на частотах  $\omega_0 \pm n\Omega$  ( $\Omega$  – частота УЗ, n=0,1,2,...), а интенсивности спектральных линий изменяются в зависимости от напряжения U на пьезопреобразователе. С увеличением напряжения на преобразователе (т.е. амплитуды УЗ) интенсивность основной линии уменьшается, проходя через минимум, а интенсивности УЗ сателлитов сначала увеличиваются, проходя через максимумы, а затем уменьшаются, проходя через минимумы. Наблюдается картина осцилляции интенсивностей линии мессбауэровского спектра рассеяния, которая соответствует когерентной УЗ модуляции, и изменения интенсивностей подчиняются закону  $J_n^2(A/\overline{\lambda})$ . При  $A/\overline{\lambda} = 2,4$  удалось практически получить зануление интенсивности основной линии, что соответствует степени

когерентности УЗ колебаний в рассеивателе, близкой к 100%. На рис.2 приведен график зависимости интенсивностей  $I_0$ ,  $I_1$ , и  $I_2$  от амплитуды когерентных УЗ колебаний.



Рис.1. Мессбауэровский спектр рассеяния фольги из нержавеющей стали под воздействием когерентных УЗ колебаний (U – напряжение на пьезопреобразователе, Ω – частота УЗ колебаний).

Таким образом, в эксперименте на рассеянии удалось реализовать когерентную УЗ модуляцию интенсивности рассеянного излучения, наблюдать эффект осцилляции интенсивностей компонент модуляпионного мессбауэровского спектра, получить практически зануление основной линии, что соответствует степени когерентности УЗ поля в рассеивателе, близкой к 100%. Полученный результат может быть использован при анализе временного и частотного поведения модулированного мессбауэровского излучения, а также в акустике поверхности.



Рис.2. График зависимости интенсивности компонент мессбауэровского спектра рассеяния нержавеющей стали от амплитуды когерентных УЗ колебаний ( $I_0$  – интенсивность основной линии,  $I_1, I_2$  – интенсивности первого и второго сателлитов).

Работа выполнена в рамках научной темы 96-707 за счет государственных централизованных источников финансирования РА.

#### ЛИТЕРАТУРА

- 1. А.Р. Миртчян, А.Р. Аракелян, Г.А. Арутюнян, Л.А. Кочарян. Письма в ЖЭТФ, 26, 599 (1977).
- A.R.Mkrichyan, G.A.Arutyunyan, A.R.Arakelyan, and R.G.Gabrielyan. Phys. Stat. Sol. (b), 92, 23 (1979).

# MÖSSBAUER SCATTERING SPECTRUM SHAPE IN THE PRESENCE OF MODULATION BY COHERENT ULTRASOUND

# E. M. HARUTYUNYAN, A. L. KOCHARIAN, L. A. KOCHARIAN, G. A. HARUTYUNYAN

The influence of ultrasound field coherence on the shape of Mössbauer scattering spectrum was investigated. In back-scattering-geometry experiment the effect of intensities oscillation of the modulation Mössbauer spectrum components was observed and the zeroing of the gamma-resonance line intensity was obtained which corresponds to the ~100% coherence of ultrasound field.

Известия НАН Армении, Физика, т.34, №2, с.103-108 (1999)

УДК 621.039.512

# МЕТОД РАСЧЕТА НЕСТАЦИОНАРНЫХ ПРОЦЕССОВ В ЯДЕРНОМ РЕАКТОРЕ

#### А. В. ОВСЕПЯН, Д. В. РАЙСЯН

#### Ереванский государственный университет

#### (Поступила в редакцию 25 декабря 1997 г.)

В работе предложен новый численный метод расчета нестационарных нейтронно-физических характеристик ядерных реакторов с неоднородной трехмерной активной зоной, основанный на моделировании распространения нейтронных потоков. Частично описана его программная реализация и приведены некоторые результаты расчетов.

#### Введение

Решение задачи определения нейтронно-физических характеристик реактора обычно сводится к численному решению интегральных или дифференциальных уравнений [1,2], что в случае динамических задач с трехмерной геометрией сопряжено с большими трудностями. Поэтому, как правило, на практике поступают следующим образом: рассматривая стационарную задачу в трехмерном реакторе, определяют некоторые константы, с помощью которых затем вычисляют динамику точечного реактора. Очевидно, что такой подход не дает полной картины происходящих в реакторе процессов. Описанный же ниже метод позволяет проследить развитие этих процессов во времени для любой точки реактора. При этом он не связан с решением каких-либо уравнений: расчет нестационарных процессов в трехмерном реакторе сводится к простому безытерационному суммированию. Учет зависимости свойств вещества от состояния производится, однако, традиционным образом, т.е. через внешний итерационный цикл.

Суть метода заключается в следующем. Реактор условно разбивается на трехмерные однородные ячейки и рассматриваются потоки нейтронов, переходящие из одной ячейки в другую. Вычислив их величину в любой момент времени, можно определить как плотность нейтронного поля, так и другие характеристики реактора.

Эту задачу можно разбить на две части: первая – определение нейтронных потоков (откликов), исходящих из различных сторон ячейки в ответ на падение единичного потока (импульса) на одну из ее сторон; вторая – связывание исходящих потоков с входными потоками соседних ячеек с учетом данной геометрии реактора и ячеек. Решение этих двух подзадач дает возможность проследить эволюцию потоков во времени. Метод и изложение ориентированы на применение ЭВМ. Заметим, что метод можно применить также, при определенной модификации, к широкому кругу задач переноса – как вещества, так и энергии.

#### 1. Общее описание метода

Разделим реактор на одинаковые элементы (ячейки) равного объема. Для максимального приближения к геометрии действующих ядерных реакторов в качестве единицы дискретизации выбрана шестигранная призма. Размер ячейки в зависимости от задачи либо определяется необходимой точностью вычислений, либо совпадает с размером реальной топливной ячейки реактора.

Вначале рассмотрим отдельный шестигранник. Со всех сторон на него падают потоки нейтронов. Поскольку поток любой формы можно представить в виде последовательности прямоутольных импульсов, то достаточно рассмотреть влияние единичного импульса нейтронов, падающего на какую-либо грань ячейки. Такой импульс вызывает распределенный во времени отклик со всех сторон шестигранника. Имея эти отклики, можно раздробить их на прямоутольные импульсы, которые будут входными импульсами для соответствующих граней соседнего шестигранника. Для вычисления этих откликов использован метод моделирования Монте-Карло [3].

Вследствие симметрии ячейки из 16-ти функций отклика существенно различны восемь: пять функций для импульса, падающего с боковой стороны (рис.1а) и три – для падающего на основание (рис.16). Функция отклика сразу задается в форме прямоугольных импульсов, которые уже можно задать в качестве входных для соседних шестигранников. На вычисление функций отклика для каждого типа вещества на компьютере Pentium-66 уходит около 2-3 минут. Заметим, что вычисление функций отклика производится лишь один раз – вначале.



Рис.1. Отклики для импульса, падающего с боковой стороны (а) и с основания (б).

Получив эти функции ( $\varphi_i(t)$ , i = 1,...8) отклика на единичный сигнал, можно построить отклик на любую функцию воздействия,  $I_+(t)$ . Поскольку рассматриваются линейные процессы, то импульсу  $I_+(t)$ , пришедшему в момент t', соответствует отклик  $I_+(t')\varphi_i(t-t')$ , где t > t', а следовательно, суммарный отклик  $I_{-}(t)$  на воздействие  $I_{+}(t)$  определяется следующим выражением:

$$I_{-}(t) = \int_{0}^{t} I_{+}(t')\varphi_{i}(t-t')dt', \qquad (1)$$

где в качестве  $\varphi_i$  берется функция отклика, соответствующая тому, с какой стороны падает поток  $I_+(t)$  и с какой стороны выходит  $I_-(t)$ .

Теперь вернемся к основной задаче. Связав выходные потоки с разных сторон каждого шестигранника с входными потоками соответствующих сторон всех граничащих с ним призм, можно проследить эволюцию всей системы, попутно определяя различные ее характеристики. Например, плотность нейтронного поля N(t) в каком-либо шестиграннике можно определить из того, сколько нейтронов должно вылететь из этой призмы в следующие моменты времени. Очевидно, что таким образом можно определить нейтронное поле с точностью до множителя, определяющегося из условий нормировки.

#### 2. Определение исходящих потоков методом Монте-Карло

Метод Монте-Карло в применении к расчету реакторов заключается в имитации процессов, происходящих с нейтроном [4]. Существует множество программ расчета различных характеристик вещества реактора методом Монте-Карло [5], однако для определения откликов на входящий импульс нейтронов этот метод не применялся. Поэтому для решения этой задачи в частном случае диффузии тепловых нейтронов нами была написана соответствующая программа.

При моделировании взаимодействия нейтронов с веществом учтены следующие процессы: упругое рассеяние нейтронов на ядрах вещества (с сечением  $\Sigma_s$ ), деление ядер горючего при поглощении нейтронов (сечение  $\Sigma_f$ ) и радиационное поглощение (сечение  $\Sigma_a$ ). Диаграмма рассеяния предположена сферически симметричной, что не должно привести к неточности, поскольку рассматриваемые процессы происходят в термальной области и направления движения нейтронов и ядер распределены равномерно.

Чтобы получить все восемь функций отклика (рис.1), необходимо последовательно рассмотреть оба случая – падение с боковой стороны и падение на основание, поэтому приведенная ниже процедура проводится два раза – по одному на каждый случай.

В программе реализован следующий алгоритм. Вначале на одной из сторон (принятой за входную) случайным образом выбирается начальная позиция падающего нейтрона. Для боковой стороны получение равномерного распределения тривиально, а для шестиугольного основания наиболее простой способ состоит в том, чтобы генерировать равномерное распределение в прямоугольнике, включающем основание, но брать только те нейтроны, которые попали внутрь его контура. В случае многогрупповой модели генерируется скорость нейтрона, в одногрупповой – скорость фиксирована (есть также возможность рассматривать непрерывный спектр скоростей). Затем генерируется направление движения нейтрона так, чтобы он влетел в шестигранник. Поскольку рассматривается диффузия тепловых нейтронов, все такие направления равновероятны. Направление движения можно задать углами  $\theta$  (полярный угол) и  $\varphi$  (азимутальный угол), предварительно какимлибо образом введя декартовы оси. Для получения равномерного распределения в пространстве генерируются случайные значения  $\varphi$  и соз $\theta$ в соответствующих пределах. По формуле

 $\lambda = -\frac{1}{\Sigma} \ln \gamma , \qquad (2)$ 

где  $\Sigma = \Sigma_s + \Sigma_a + \Sigma_f$  – полное макроскопическое сечение всех реак-

ций, а  $\gamma$  – случайное число в интервале (0,1) (из  $\int_{0}^{x} P(x)dx / \int_{0}^{\infty} P(x)dx = \gamma$ ,

где  $P(x) = \exp(-\Sigma x)$  – плотность распределения длин свободного пробега), разыгрывается длина свободного пробега. Нейтрон перемещается внутрь шестигранника, его координатам придается приращение:

$$\begin{array}{l} x \to x + \lambda \sin \theta \cos \varphi, \\ y \to y + \lambda \sin \theta \sin \varphi, \\ z \to z + \lambda \sin \theta, \end{array} \tag{3}$$

а текущее время для нейтрона увеличивается на  $\lambda/\nu$ , где  $\nu$  – скорость нейтрона. Пройдя это расстояние, нейтрон либо вылетит из ячейки, либо столкнется с ядром внутри нее. Если он вылетел, определяется сторона и момент вылета, нейтрон регистрируется и на этом его рассмотрение заканчивается. Чтобы определить сторону вылета, необходимо хранить не только координаты нейтрона в текущий момент, но и его прежние координаты. Тогда стороной вылета можно считать грань, которую пересекает отрезок, соединяющий предыдущее и настоящее положения нейтрона. Если нейтрон по-прежнему находится внутри, то при помощи макроскопических сечений  $\Sigma_f$ ,  $\Sigma_s$  и  $\Sigma_a$  разыгрывается

процесс, который произошел с ним. Если этот процесс – рассеяние, то просто по выбранной диаграмме рассеяния меняется направление и (в многогрупповой модели) величина скорости, и нейтрон прослеживается дальше. Если произошло радиационное поглощение, факт поглощения фиксируется и рассмотрение этого нейтрона прекращается. Если же произошло деление ядра, то аналогично, но уже с места и времени рождения последовательно прослеживаются два новообразованных нейтрона.

После полного рассмотрения данного нейтрона переходим к следующему и так далее до тех пор, пока результат не насытится, то есть новые порции нейтронов не будут вносить существенного вклада в функции отклика.

Для того, чтобы выяснить, когда набралась достаточная статистика, мы регистрируем данные достаточно большой партии нейтронов (обозначены через {n}) отдельно и, сначала проверив, внесла ли эта партия значительные изменения в общие результаты  $\{N\}$ , суммируем их к общим данным. Если вклад этой партии сильно изменил результаты, т.е.  $\frac{\{N\}_{new} - \{N\}_{old}}{\{N\}_{new}} = \frac{\{n\}}{\{N\}_{new}} > \varepsilon$ , где  $\varepsilon$  определяется необходимой точностью, то значит, необходимо продолжать набирать статистику, если

же нет – вывести результаты и завершить программу.

Аналогично можно рассчитывать не только топливные ячейки, но также и определять функции отклика для вещества поглотителя, замедлителя, т. е для любого вещества или смеси, сечения которых известны.







При помощи составленной нами программы получены функции отклика для различных веществ. На рис. 2 изображены отклики для среды с коэффициентом размножения  $K_{ee} \approx 1$ . Как и следовало ожидать,

максимальный отклик наблюдается на стороне падения, а наиболее растянутый отклик – у дальних сторон. Выясняется, что вид этих функний мало зависит от степени выгорания топлива, т.е. в том интервале значений, в котором меняются сечения с выгоранием топлива, функции отклика почти не изменяются. Предварительные расчеты показали, что общая картина эволюции реактора не должна сильно зависеть от формы функций, а скорее от величины и соотношения их интегралов.

При завершении расчетов функции отклика передаются программе, реализующей общий метод. Эта вторая часть реализации метода находится в стадии разработки и будет описана нами в дальнейшем.

#### ЛИТЕРАТУРА

- 1. Р. Мегреблиан, Д. Холмс. Теория реакторов. М., Госатомиздат, 1962.
- 2. Е.Д.Беляева, Д.М.Петрунин. Препринт ИАЭ-2093. М., 1971.
- 3. И. М. Соболь. Метод Монте-Карло. М., Наука, 1968.
- А.Д.Франк-Каменецкий. Моделирование траскторий нейтронов при расчете реакторов методом Монте-Карло. М., Атомиздат, 1978.
- Эксплуатационные режимы водо-водяных энергетических ядерных реакторов. М., Атомиздат, 1979.

#### ՄԻՋՈԻԿԱՅԻՆ ՌԵԱԿՏՈՐՈՒՄ ՈՉ ՍՏԱՅԻՈՆԱՐ ՊՐՈՅԵՄՆԵՐԻ ՀԱՇՎԱՐԿԻ ՄԵԹՈԴ

#### Ա. Վ. ՀՈՎՄԵՓՅԱՆ, Դ. Վ. ՌԱՅՍՅԱՆ

Աշխատանքում առաջարկված է ոչ համասեռ եռաչափ ակտիվ զոնայով միջուկային ռեակաորների ոչ առացիոնար նեյտրոնա-ֆիզիկական բնւթագրերի հաշվարկի նոր թվային մեթող, որը հիմնված է նեյտրոնային հոսքերի տարածման մոդելավորման վրա։ Մասնակիորեն նկարագրված է նրա ծրագրային իրագործումը և թերված են հաշվարկների որոշ արդյունքներ։

### NON-STATIONARY PROCESSES CALCULATION METHOD FOR THE SIMULATION OF NUCLEAR REACTOR

#### A. V. HOVSEPYAN, D. V. RAYSYAN

A new numerical method for calculation of the non-stationary neutron-physical characteristics of nuclear reactors with a heterogeneous three-dimensional active zone based on the simulation of spreading of the neutron streams is presented. The description of the program and some of the obtained results of computation are presented as well.

Известия НАН Армении, Физика, т.34, №2, с.109-118 (1999)

УДК 532.783

# ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ НЕКОТОРЫХ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ СМЕКТИЧЕСКИХ МАТРИЦ С ХИРАЛЬНЫМИ ДОБАВКАМИ

# А.Ц.САРКИСЯН, К.К.ВАРДАНЯН, З.В.БАГДАСАРЯН, С.М.ЯЙЛОЯН

Институт прикладных проблем физики НАН Армении

(Поступила в редакцию 30 августа 1998 г.)

Методами ЭПР спектроскопии и поляризационной микроскопии проведено исследование фазовых переходов в жидкокристаллических системах, состоящих из смектической матрицы и хиральной добавки. Определен параметр порядка, оценены коэффициенты вязкости исследованных систем в сегнетоэлектрической фазе.

Исследования жидких кристаллов методом ЭПР спектроскопии представляют большой интерес. Это обусловлено тем, что упорядоченность молекул в жидких кристаллах весьма просто связана с положением и сверхтонким расщеплением резонансных линий, в то время как динамические свойства отражаются в ширине линий.

В настоящей работе методом ЭПР с помощью спинового зонда и методом поляризационной микроскопии проведено исследование параметра порядка и коэффициента вязкости в жидкокристаллических (ЖК) системах, состоящих из смектической матрицы и хиральной добавки (с различными концентрациями: 5, 7, 20 %). В качестве смектических матриц были выбраны 4-пентил-N-(4-пентилокси-2-гидроксибензилиден) амино – {16} и 4-октокси-4'-нонилазобензол – {18}, а в качестве хиральных добавок – d-2-метилбутил-4-гептилоксибифенил-4'(карбоксилат) – {15} и 4-(d-3-метилпентил) – октилоксибифенил – {21}. Ниже приведены химические формулы компонентов исследованных систем, а также температуры фазовых переходов в этих системах:





OH

Кристалл(K<sub>1</sub>)  $\frac{34^{\circ}C}{M}$  K<sub>2</sub>  $\frac{46^{\circ}C}{M}$  смектикС\*(CMC\*)  $\frac{55^{\circ}C}{M}$  смектикА(CMA)  $\frac{60^{\circ}C}{M}$ 

хиральный нематик (XH) 65°С изотропная жилкость (ИЖ) - {16}/{21}

(5,7,20%).  $K \frac{46^{\circ}C}{CMC} C_{M}C^{*} \frac{55^{\circ}C}{CMA} C_{M}A \frac{60^{\circ}C}{CMC} XH \frac{65^{\circ}C}{M}M - \{16\}/\{15\} (5,7,20\%).$   $K \frac{49^{\circ}C}{CMC} C_{M}C^{*} \frac{60^{\circ}C}{CMA} C_{M}A \frac{66^{\circ}C}{C} XH \frac{72^{\circ}C}{M}M - \{18\}/\{21\} (5,7,20\%).$   $K \frac{49^{\circ}C}{CCMC} C_{M}C^{*} \frac{60^{\circ}C}{CMA} C_{M}A \frac{66^{\circ}C}{C} XH \frac{72^{\circ}C}{M}M - \{18\}/\{15\} (5,7,20\%).$ 

Отметим, что в указанных системах добавление закручивающих веществ (хиральных добавок) к смектическим жидким кристаллам приводит к проявлению в определенном температурном интервале псевдособственного сегнетоэлектричества (как показали измерения спонтанной поляризации, проведенные по принципу Сойера-Тауера). К тому же, по сравнению с индивидуальными ЖК сегнетоэлектриками {15}, {21} [1] исследованные системы обладают в десятки раз большей величиной спонтанной поляризации и более широким температурным интервалом существования сегнетоэлектрической фазы. В связи с этим они представляют большой практический интерес, обусловленный, в первую очередь, возможностью их использования в линейных электрооптических устройствах с высоким быстродействием и низкими управляюшими напряжениями. Отметим также, что ЖК системы, как правило, обладают богатым полимезоморфизмом, что делает их весьма интересными объектами для исследования в них природы мезоморфных преврашений.

ЭПР исследования проводились на спектрометре РЭ-1301 с высокочастотной модуляцией f = 975 кГц. В качестве парамагнитного зонда использовался нитроксильный радикал 2,2,6,6-тетраметил-4-оксипиперидин-1-оксил (ТМОПО). Структурная формула и молекулярные оси этого радикала приведены на рис.1. Для получения гомогенного раствора ЖК систем и равномерного по объему распределения спинового зонда в исследуемых объектах, образцы приготовлялись смешиванием компонентов при высоких температурах. Полученная смесь тщательно перемешивалась и затем тонкостенная стеклянная ампула диаметром ~5 мм заполнялась исследуемым образцом. Для сведения к минимуму уширения линий из-за диполь-дипольного взаимодействия концентрация нитроксильного радикала взята достаточно низкой: ~10<sup>-4</sup> моль/л. Заполненные ампулы медленно охлаждались до комнатной температуры, и только после этого проводилась регистрация спектров ЭПР.



Рис.1. Структурная формула нитроксильного радикала (ТМОПО) и его молекулярная координатная система.





На рис.2 приведены спектры нитроксильного радикала в ЖК системе {16}/{15} (7%) при различных температурах. Существующие методы анализа спектров ЭПР позволяют в условиях быстрого вращения радикала в однородно-ориентированных либо не ориентированных жидкокристаллических образцах определить степень упорядоченности зонда и судить таким образом о его ориентации в среде. Известно, что длинные оси молекул в ЖК фазе имеют тенденцию ориентироваться параллельно одна другой. Среднюю ориентацию молекул в ансамбле, сгрушированных в относительно небольшой области образца, можно в этом случае охарактеризовать направлением z (связав с ним молекулярную декартову систему координат x, y, z), относительно которого движение молекул имеет цилиндрическую симметрию. В случае однородноориентированных образцов возникает простейшая ситуация, когда оси z в указанных областях выстроены параллельно друг другу и все микрообласти имеют одну и ту же ориентацию относительно внешнего магнитного поля Ho. В нематических жидких кристаллах подобное параллельное выстраивание осей легко вызывается приложением достаточно сильного магнитного поля (каковым является постоянное магнитное поле, применяемое в обычном ЭПР-эксперименте). Аналогично термотропные смектические фазы при медленном охлаждении вещества из нематической или изотропной фазы также могут ориентироваться в магнитном поле. Формы спектров спинового зонда в исследованных ЖК системах в нематической (XH) и смектических (СмС\*, СмА) фазах показали, что данные образцы являются однородно-ориентированными. А количественный анализ формы спектров, проведенный на основе хорошо разработанной теории спиновой релаксации [2], показал, что значения времени корреляции вращения радикала находятся в области быстрых вращений ( $10^{-6}$  сек >  $\tau_c$  > 0,6· $10^{-11}$ , где  $\tau_c$  – время корреляции вращения радикала). Для вычисления параметра порядка было использовано следующее выражение [3]:

$$S = \frac{A_{\parallel} - A_{\perp}}{A_{z'z'} - A_{x'x'}} \frac{a_{N}}{a_{N}'},$$
 (1)

где  $a_N$  – изотропная константа сверхтонкого расщепления:  $a_N = = 1/3(A_{x'x'} + A_{y'y'} + A_{x'x'});$   $A_{x'x'} = 31 \Gamma c$ ,  $A_{y'y'} = 5,2 \Gamma c$ ,  $A_{z'z'} = 5,2 \Gamma c$  – главные значения тензора константы сверхтонкого расщепления нитроксильного радикала (координатная система x', y', z' связана с радикальным фрагментом (см. рис.1)),  $A_{\parallel}$  – константа сверхтонкого расщепления экспериментального спектра в случае, когда постоянное магнитное поле направлено параллельно оси z молекулярной системы координат (см. рис.2);  $A_{\perp}$  – константа сверхтонкого расщепления при  $H \perp z$  и определяется следующим образом:  $A_{\perp} = 1/2(A_{z'z'} - A_{x'x'}) - A_{\parallel} + 3/2A_{x'x'}; a'_N$  определяется выражением  $a'_N = 1/3(A_{\parallel} + 2A_{\perp})$ , которое эквивалентно выражению для  $a_N$ , но индекс "штрих" указывает на то, что значения полярности в монокристалле и в ЖК фазе не идентичны, и  $a'_N$  вносится в выражение (1) в качестве поправки.

Результаты расчетов параметра порядка (5) в зависимости от температуры приведены в графической форме на рис.3. Начнем обсуждение с фазового перехода ХН – ИЖ. Отметим, что в спектрах ЭПР при этом переходе в исследованных системах наблюдался гистерезис (при охлаждении линии спектров изменялись при более низкой температуре, чем при нагреве). На существование такого термического гистерезиса, типичного для фазовых переходов первого рода, указали также микроскопические исследования бинарных систем. Многократные наблюдения фазового перехода ХН – ИЖ показали, что в образцах бинарных систем {16}/{21}(5,7,20%), {16}/{15}(5,7,20%) при охлаждении изотропная жидкость переходит в хиральный нематик при температуре на 3°С ниже той температуры, при которой происходит обратный переход при нагреве, а в



Рис.3. Зависимость параметра порядка от температуры в жидкокристаллических смесях: 1-{16}/{21}(7%), 2-{16}/{15}(7%), 3-{16}/{21}(20%), 3-{16}/{21}(20%), 4-{16}/{21}(20%), 5-{18}/{21}(7%), 6-{18}/{15}(7%), 7-{18}/{21}(20%), 8-{18}/{15}(20%).  $\beta$  – критический показатель,  $T_{\rm NA}$  – точка перехода СмА-ХН,  $T_{\rm NI}$  – точка перехода ХН-ИЖ,  $\Delta T = T - T'_N$ , где  $T'_N$  – точка перехода ИЖ-ХН при охлаждении.

образцах бинарных систем {18}/{21}(5,7,20%), {18}/{15} (5,7,20%) – на 2°С ниже. Однако, как видно из рис.3, в исследованных системах при фазовом переходе ХН – ИЖ параметр порядка скачкообразно не уменьшается, хотя наличие термического гистерезиса, характерного для фазовых переходов первого рода, предсказывает такое поведение. Чтобы объяснить такое поведение S, нужно вспомнить, что требование о наличии термического гистерезиса при фазовом переходе ХН – ИЖ вытекает из рассмотрения этого перехода в рамках теории фазовых переходов Ландау [4]. С другой стороны, известно, что область тем-

ператур применимости теории Ландау связана с молекулярными параметрами соотношением

$$(T - T_{NI}) / T_{NI} \ge \langle r \rangle^{\circ} / r_0^{\circ},$$
 (2)

где T – температура, T<sub>NI</sub> – точка просветления, <r> – среднее расстояние между молекулами, r0 - радиус действия межмолекулярных сил [4]. Если предположить, что ответственными за упорядочение молекул в исследуемых системах вблизи перехода ХН - ИЖ являются короткодействующие дисперсионные силы (ro ≈<r>), то из условия (2) становится ясно, почему теория Ландау не применима в значительной области температур фазового перехода. В температурной области, где неприменима теория Ландау, хорошо работает так называемая теория подобия (или скейлинг-теория) [4]. В этой теории предполагается, что поведение термодинамических величин вблизи температуры перехода целиком определяется большими масштабами порядка радиуса коррелянии циботактических групп (взаимодействием флуктуаций) и не завнсит от деталей взаимодействия. На существование таких упорядоченных групп непосредственно выше температуры фазового перехода указывают измерения оптической плотности в зависимости от температуры (см. рис.4). Из этого рисунка видно, что непосредственно выше точки просветления рассеяние лазерного луча еще значительно, хотя рассеяние изотропной фазой меньше, чем нематической мезофазой. В теории предполагается также, что термодинамические величины степенным образом зависят от близости к точке перехода. В частности, для параметра порядка эта зависимость имеет вид

$$S \sim \Delta T^{\beta}$$
, (3)

где  $\Delta T = T - T_{NI}^*$  ( $T_{NI}^*$  – температура перехода ИЖ – ХН при охлаждении),  $\beta$  – критический показатель. Поскольку в теории подобия, как и в теории фазовых переходов Ландау, по значению критического показателя термодинамических величин можно определить тип перехода, то используя результаты расчетов параметра порядка (см.рис.3), из выражения (3) были рассчитаны критические показатели  $\beta$  в исследуемых системах. Расчеты показали, что  $\beta \approx 0,26$ . Из этого следует, что фазовый переход ХН – ИЖ в исследованных системах, по-видимому, лучше всего описывать как комбинированный фазовый переход в системах с короткодействующими взаимодействиями молекул, близкий к трикритической точке Лифшица [4].

Остановимся коротко на обсуждении фазового перехода СмА – ХН в исследованных системах по поведению ориентационного параметра порядка (S). Как видно из рис.3, во всех бинарных системах при переходе СмА – ХН значения S скачкообразно уменьшаются при температурах 60°С и 66°С для смесей {16}/{21}(5,7,20%), {16}/{15}(5,7,20%) и {18}/{21}(5,7,20%), {18}/{15}(5,7,20%) соответственно. Такое поведение S типично для фазовых переходов первого рода. Отметим, что в микроскопической теории Мак-Миллана получены количественные критерии, касающиеся зависимости типа перехода СмА – ХН от близости перехода из ХН фазы в изотропную жидкость к переходу СмА – ХН [4]. Напомним, что этими критериями являются: a)  $T_{NA} / T_{NI} < 0.87$  – оказывается возможным фазовый переход первого рода ( $T_{NA}$  – температура



Рис.4. Зависимость оптической плотности от температуры в жидкокристаллических смесях: 1-{16}/{21}(7%), 2-{16}/{15}(7%), 3-{18}/{21}(20%), 4-{18}/{15}(20%). Направление поляризации лазерного луча параллельно направлению планарной ориентации ячеек с толщиной 20 мкм.

перехода СмА – ХН), б)  $T_{NA}/T_{NI} > 0,87$  – оказывается возможным фазовый переход второго рода. Поскольку с помощью микроскопических наблюдений были определены температуры фазовых переходов в исследуемых системах (см. выше), вышеуказанные критерии для этих систем выглядят так:  $T_{NA}/T_{NI} = 0,92 > 0,87$  для систем {16}/{21}(5,7,20%), {16}/{15}(5,7,20%),  $T_{NA}/T_{NI} = 0,91 > 0,87$  для систем {18}/{21}(5,7,20%), {18}/{15}(5,7,20%). Отсюда следует, что фазовый переход СмА – ХН в исследуемых системах должен иметь черты фазового перехода первого рода, что находится в полном согласии с вышеуказанным поведением S, типичным для фазовых переходов первого рода, вблизи фазового перехода СмА – ХН в исследуемых системах (см. рис.3). Таким образом, можно подытожить, что критерии для определения типа перехода СмА – ХН, полученные из микроскопической теории Мак-Миллана, в исследованных системах экспериментально подтверждаются.

Известно, что в области быстрых вращений, изотропная переориентация спинового зонда характеризуется одним-единственным временем корреляции. Время корреляции  $\tau$ , зависит от эффективного радиуса r радикала и локальной вязкости  $\eta$  растворителя следующим образом [5]:

$$\tau_r = 4\pi \eta r^3 / 3k_B T, \tag{4}$$

где  $k_B$  – постоянная Больцмана, T – температура среды. Таким образом, измерение ширины линий  $\Delta H$  спектров ЭПР (см. рис.2), позволяет не

только определить время корреляции вращения радикала в среде, но и оценить локальную вязкость растворителя, которую испытывает при вращении в нем спиновый зонд. Однако, если движение в ЖК фазе анизотропно, то вращение радикала не является сферически симметричным и не может быть описано одним значением т. При соблюдении условия быстрого вращения анизотропное броуновское вращение частицы можно описать, задав частоты ее вращения вокруг разных осей самой частицы. Так, вращение аксиально симметричного эллипсоида можно охарактеризовать двумя частотами, одна из которых  $\tau_1^{-1}$  соответствует вращению частицы относительно оси симметрии эллипсоида, а другая  $\tau_{\perp}^{-1}$  соответствует вращению частицы относительно любой оси эллипсоида, перпендикулярной к его оси симметрии. Если вращение в пространстве может происходить в равной степени как за счет вращения радикала вокруг длинной полуоси эллипсоида, так и за счет вращения вокруг коротких полуосей, то частота этого сложного вращения должна являться полусуммой частот составляющих его вращений:  $\tau^{-1} = (\tau_1^{-1} + \tau_{\perp}^{-1})/2$ . В противном случае, когда в пространстве вращение осуществляется исключительно вокруг коротких полуосей эллипсоида, форма спектра эллипсоида должна определяться временем г. Таким образом, чтобы определить значения г,, нужно определить, во-первых, оба времени, и во-вторых, распределение координатных осей радикального фрагмента x', y', z' по отношению к молекулярной системе координат (x, y, z). Для количественного анализа спектров применялась модель вращательной диффузии [5]. Для упрощения анализа спектров ЭПР в [5] предполагается, что тензор вращательной диффузии является аксиально-симметричным. Времена корреляции из спектров ЭПР можно вычислить при помощи уравнения [2,5]

$$\Delta H(m) = \sum (A_n + B_n m + C_n m^2) \tau_{(n)} + X, \qquad (5)$$

где  $\tau^{-1}(n) = \tau_{\perp}^{-1} + (n^2/6)(\tau_{\perp}^{-1} - \tau_{\perp}^{-1}), (n = 0, 1, 2), m = -1; 0:1$  – магнитное квантовое число, коэффициенты А, В, С, (получены по теории возмущений) являются функциями электронно-спиновых параметров и времен корреляции и зависят от ориентации радикального фрагмента по отношению к осям эллипсоида; постоянная Х не зависит от т и введена для учета всех возможных вкладов, не связанных с рассматриваемым механизмом уширения. Решив систему уравнений (5) относительно времен корреляции, можно их выразить через параметры линий спектра и, тем самым, определить значения времен корреляции для данной температуры в трех разных случаях ориентации оси z относительно осей x', y', z'. Для установления распределения координатных осей радикального фрагмента по отношению к молекулярной системе координат, а значит, и для выбора нужной пары значений времен корреляции, используя выражения для B<sub>n</sub>, C<sub>n</sub> нами были вычислены значения выражения  $\sum B_n / \sum C_n$  и сопоставлены со значениями выражения  $\sum B_n / \sum C_n$ . Коэффициенты B<sub>n'</sub>, C<sub>n</sub>, были получены из выражений B<sub>n</sub>, C<sub>n</sub> при условии

быстрого вращения, когда они практически перестают зависеть от т. и т. [3]. Для проведения расчетов на ЭВМ была разработана специальная программа на языке "Фортран". Машинные расчеты показали, что в области быстрого вращения раликала параметр анизотропии вращения N во всех системах не зависит от температуры и составляет  $N = 2.2 \pm 0.4$ , а ось z молекулярной системы координат совпадает с осью у' системы. связанной с раликальным фрагментом. Тот факт. что в случае исследуемых систем параметр N постоянен, соответствует гидродинамической модели вращения, что делает использование выражения (4) для оценки коэффициента вязкости вполне обоснованным. А факт совпадения оси z с осью у' позволяет охарактеризовать вращение радикала в образцах одним временем: т, ≈ т (вращение осуществляется вокруг короткой полуоси эллипсоида). Отметим, что в расчетах молекулы радикального фрагмента аппроксимировались сферами радиуса r≈2,3 Å. Результаты расчетов при фиксированной температуре (52°С) приведены в табл. I. Отметим, что при этой температуре все системы находятся в сегнетоэлектрической фазе. Как видно из таблицы, повышение концентрации добавок во всех системах приводит к увеличению вязкости среды. Можно предположить, что это связано с изменением относительного количества образующихся ассоциатов в средах бинарных систем.

Вещество	Концентрация	Время корреля- ции, $\tau_r(c)$	Вязкость η(пуаз)·10 <sup>-2</sup>
{16}/{21}	7%	3.13.10-9	1.4
	20%	6.24-10-9	2.8
{16}/{15}	7%	2.24.10-9	1.0
	20%	5.65.10-9	2.5
{18}/{21}	7%	6.2.10-10	0.3
	20%	2.27.10-9	1.0
{18}/{21}	7%	7.4.10 <sup>-10</sup>	0.3
	20%	2.35.10-9	1.1

Табл.1. Вязкостные характеристики бинарных систем при T = 52°С.

Расчеты энергии парного взаимодействия молекул в бинарных смесях, проведенные методом атом-атом потенциалов, показали, что энергетически наиболее выгодной упаковкой молекул в смесях является образование смешанных димеров, что обусловлено структурными особенностями молекул компонентов бинарных систем (наличие СОО, ОН, СН<sub>3</sub> полярных групп). Резонно предположить, что повышение концентрации добавок в смесях приводит к увеличению относительного количества смешанных димеров, а это, в свою очередь, приводит к увеличению вязкости сред. Сравнение значений  $\eta$  в системах с одинаковой матрицей, но с различными добавками при одинаковых концентрациях показывает, что в средах смесей {16}/{21}(5,7,20%) вязкость болыше, чем в средах смесей {16}/{15}(5,7,20%) (см. табл.1). Можно предположить, что

обусловлено изменением относительного количества тоже смешанных димеров при замене одной хиральной добавки другой в **JTO** смесях с матрицей {16}. Расчеты энергии парного взаимодействия молекул в вышеуказанных смесях подтверждают такое предположение. Благодаря наличию поперечной сильнополярной группы СОО (2,5 Дебай) в остове молекул добавки {15} энергия парного взаимодействия в димерах, состоящих из молекул матрицы {16} и добавки {15}, меньше (Emin = -16,48 ккал/моль), чем в димерах, состоящих из молекул матрицы {16} и добавки {21} (Emin = -17,55 ккал/моль). Вышеуказанным образующихся изменением относительного количества смешанных димеров, вызванным структурными особенностями молекул, нужно объяснить также и тот факт, что в средах смесей, где в качестве матрицы фигурирует вещество {16}, вязкость больше (благодаря наличию ОН полярной группы (1,7 Дебай) в остове молекул матрицы, энергия парного взаимодействия в смешанных парах больше), чем в средах смесей, где в качестве матрицы фигурирует вещество {18}. Из сказанного следует, что структурные особенности молекул компонентов бинарных систем существенно влияют на их вязкостные характеристики.

#### ЛИТЕРАТУРА

- 1. А.Ц.Саркисян, Л.С.Бежанова, С.М.Яйлоян, Э.Б.Абрамян, К.К.Варданян, З.В.Багдасарян. Изв. НАН Армении, Физика, 33, 304 (1998).
- 2. А.Н.Кузнецов. Метод спинового зонда. М., Наука, 1976.
- 3. GR.Luckhurst, M.Setaka, C.Zannoni. Mol. Phys., 28, 49 (1974).
- 4. А.С.Сонин. Введение в физику жилких кристаллов. М., Наука, 1983.
- 5. C.F.Polnaszek, J.H.Freed. J. Phys. Chem., 79, 22 (1975).

# ՈՐՈՇ ԽԻՐԱԼԱՅԻՆ ԱՎԵԼՅՈՒԿՆԵՐՈՎ ՍՄԵԿՏԻԿ ՄԱՏՐԻՅՆԵՐԻ ՀԵՂՈՒԿ ԲՅՈՒՐԵՂԱԿԱՆ ՀԱՄԱԿԱՐԳԵՐԻ ՓՈՒԼԱՅԻՆ ԱՆՅՈՒՄՆԵՐԻ ՀԵՏԱՉՈՏՈՒԹՅՈՒՆԸ

Ա. Ց. ՍԱՐԳՍՅԱՆ, Կ. Կ. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ, Չ. Վ. ԲԱՂԴԱՍԱՐՅԱՆ, Մ. Մ. ՅԱՅԼՈՅԱՆ

ԻՊՌ սպեկտրասկոպիայի և բևեռացումային մանրադիտակի մեթողներով կատարված է փուլային անցումների հետազոտություն սմեկտրիկ մատրիցից և խիրալային ավելցուկից կազմված հեղուկ բյուրեղական համակարգերում։ Որոշված է կարգի պարամետրը, գնահատված են սեգնետաէլեկտրական փուլում հետազոտված համակարգերի մածուցիկության գործակիցները։

#### INVESTIGATION OF PHASE TRANSITIONS IN SOME LIQUID CRYSTAL SYSTEMS OF SMECTIC MATRIXES WITH CHIRAL ADDINGS

A. Ts. SARKISSYAN, K. K. VARTANYAN, Z. V. BAGHDASARYAN, S. M. YAYLOYAN

Using the methods of EPR spectroscopy and polarizing microscope, an investigation of phase transitions in liquid crystal systems consisting of smectic matrix and chiral adding, is carried out. The order parameter is determined and the viscosity coefficients of investigated systems in the ferroelectric phase are estimated. Известия НАН Армении, Физика, т.34, №2, с.119-125 (1999)

УДК 548.732

# ПОНИЖЕННАЯ РОЛЬ ЭЛЕКТРОНОВ В ПРОЦЕССЕ РАССЕЯНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ СОВЕРШЕННЫМИ МОНОКРИСТАЛЛАМИ ПРИ ВНЕШНИХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ

#### М. А. НАВАСАРДЯН, Р. Ц. ГАБРИЕЛЯН

Ереванский государственный университет

#### (Поступила в редакцию 22 сентября 1997 г.)

На основе уже опубликованных работ и рассматривая вопрос о применимости квазиплоской волны, выдвинуто предположение, что в процессе рассеяния рентгеновских лучей совершенными монокристаллами при внешних воздействиях электроны не играют основной роли, так как кристаллы, состоящие из атомов с малым числом электронов, полностью рассеивают проходящее рентгеновское излучение в направлении дифракции (полная переброска). В процессе рассеяния решающая роль приписывается диполям или другим конфигурациям зарядовых систем, возникающим в кристалле при наличии внешних воздействий.

Общеизвестно, что электронам в атоме приписывается главная, решающая роль при рассеянии рентгеновских лучей кристаллами (веществами) и с помощью совокупностей величин рассеянных интенсивностей дифрагированных на разных атомных плоскостях рентгеновских пучков определяются местонахождения атомов внутри элементарной ячейки данной структуры. На этом принципе основан метод рентгенструктурного анализа.

Величина отражательной способности (интегральной интенсивности) данного семейства атомных плоскостей кристалла определяется в основном структурным фактором данного отражения F исследуемого кристалла, и эта способность дается выражением

$$\rho_k = \frac{E\omega}{J} = \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 |F|^2 \cdot \frac{1 + \cos^2 2\theta}{\sin 2\theta} \cdot \frac{N^2 \lambda^3}{2} \tag{1}$$

для идеально мозаичного кристалла (кинематический случай дифракции), а для совершенного кристалла (динамический случай дифракции) [1]

$$\rho_g = \frac{E\omega}{J} = \frac{8\pi N\lambda^2}{2\sin 2\theta} \cdot \frac{e^2}{mc^2} \cdot |F| \frac{1+|\cos 2\theta|}{2}.$$
 (2)

Структурный фактор определяется формулой

$$F = \sum_{i} f_i \cdot \cos 2\pi (hx_i + ky_i + lz_i).$$
<sup>(3)</sup>

Здесь e, m – заряд и массса электрона, c – скорость света,  $\lambda$  – длина волны падающего излучения, N – число рассеивающих единиц со структурным фактором F в единице объема,  $\theta$  – угол Брэгга,  $f_i$  – атомный фактор рассеяния даного атома, h, k, l – индексы Миллера данного отражения,  $x_i, y_i, z_i$  – координаты атомов в элементарной ячейке.

Как видно из формул, основная, решающая роль в определении интенсивности данного отражения приналлежит структурному F и атомному  $f_i$  факторам рассеяния. При этом  $f_i$  не может превышать число электронов данного атома  $z_i$ , и по мере увеличения числа  $z_i$  увеличивается и  $f_i \cdot f_i$  и F по определению являются отношениями амплитуд волн, рассеянных одним атомом и элементарной ячейкой, соответственно, к амплитуде рассеяния одним электроном.

Интенсивность отраженного пучка, когда расчеты производятся по кинематической теории рассеяния рентгеновских лучей, как видно из формулы (1), определяется квадратом структурного фактора  $|F|^2$ , а в динамической теории, которая верна для совершенного монокристалла, – первой степенью (2). Из сказанного ясно, что интенсивности пучков, дифрагированных на разных кристаллических структурах, могут отличаться друг друга от нескольких до нескольких тысяч раз, в зависимости от атомных номеров составляющих решетку атомов и от совершенства кристаллов.

Однако эксперименты по вынужденному увеличению рассеянной энергии (в дифрагированном пучке) температурным градиентом или УЗ колебаниями у заведомо обладающих совершенной структурой монокристаллов, проведенные в тридцатых годах [2-5] и позже [6-13], с сегодняшней точки зрения требуют некоторого пересмотра существующих представлений относительно связи интенсивности дифрагированного пучка с числом электронов в элементарной ячейке.

Прежде всего рассмотрим внешнее проявление явления. Согласно старым трактовкам, увеличение интенсивности отраженного пучка при внешних воздействиях объяснялось увеличением угловой области дифрагированного пучка [5,10,14] - от нескольких угловых секунд (для совершенных кристаллов) до нескольких угловых минут. Такое увеличение происходит при переходе от динамического к кинематическому пределу рассеяния рентгеновских лучей кристаллами. В эксперименте увеличение происходит при повышении уровня мозаичности монокристалла или же появлении градиента межплоскостного расстояния △d/∆x. Кроме того, предполагалось, что при внешних воздействиях одновременно уменьшается первичная экстинкция [5,14], т.е. если речь шла бы о малой угловой области падающего пучка в несколько угловых секунд (плосковолновое приближение - угловая ширина падающего пучка равна или меньше угловой ширины дифрагированного пучка), то интенсивность отраженной волны уменьшалась бы, а интенсивность проходящего пучка увеличивалась бы при внешних воздействиях.

Однако в работах [12,13,15], выполненных несколько позже (фактически с применением квазиплоской волны, о которой в них не говорится), также наблюдается многократное увеличение интенсивности дифрагированного пучка. В этих работах сильно уменьшается проходящий поток, вплоть до полного его отсутствия (полная переброска).

В ранних экспериментах (до 1982г.) применялись широкие (сферические) пучки с непрерывным спектром и всегда измерялись интенсивности отраженых пучков и ни разу не было измерено и исследовано поведение проходящего пучка. Реальная картина поведения проходящего и отраженного пучков при использовании плоской и квазиплоской падающей волны при внешних воздействиях представлена на рис.1, заимствованном из работ [13,15]. Как видно из рис.1а, центральная часть проходящего Ка. пучка отсутствует (сверху вниз), т.к. эта часть пучка переброшена в направление отражения, а проходящий Ка пучок с меньшей угловой шириной  $\Delta \theta$  полностью переброшен в направление отражения. В последнем случае по направлению прохождения остались только те части лентообразного пучка, которые не пересекли кристаллический образец. Факт увеличения интенсивности отраженного пучка в плосковолновом приближении при нарушении кристаллической матрицы находится в резком противоречии с уже имеющимися представлениями, т.к. большая первичная экстинкция (большая интенсивность отраженного пучка) характерна только для совершенных монокристаллов.

В работах [13,15] в качестве квазиплоских волн применялись отраженные от поверхности кристалла SiO, пучки и аномально-проходящий пучок (АП) от германия с толщиной t = 0.3 мм при  $\mu > 10$  ( $\mu$ линейный коэффициент поглошения германия). Пучок от германия, проходя через второй кристалл из кварца, целиком - как по ширине, так и по длине, переходит в направление дифракции (см. рис.16 слева "О", где с правой стороны этого же рисунка "П" между верхним и нижними неизменяющимися концами лентообразного пучка виден только слабый след проходчщего пучка). Поскольку угловая ширина падающего пучка (АП пучка) меньше, чем угловая ширина отражения кварца (µ ~1) без градиента температуры, то понятно, что градиент не может привести к захвату новых угловых областей у падающего пучка, так как таких пучков нет. Следовательно, интенсивность отраженного пучка увеличивается за счет прохолящего пучка от той же малой (3") угловой области. Интенсивность дифрагированного пучка не может быть изменена также увеличением F, т.к. количество электронов в данном объеме существенно не меняется. Не меняются также координаты атомов, фигурирующие в функции косинуса в формуле (3), поскольку относительная деформация кристалла очень мала.

К вышеизложенному прибавляется и другое, очень существенное обстоятельство. Веществом кварца, состоящим из атомов с малым числом электронов (кремний и кислород), удается приложением температурного градиента полностью рассеивать (перебросить) квазиплоскую монохроматическую волну в направлении дифракции, т.е. формулы (1) и (2) лишаются своего обычного смысла (интенсивности больше не определяются числом электронов в элементарной ячейке кристалла). Иными словами, независимо от числа электронов в образце пучок может полностью рассеиваться в нем. Аналогичное поведение отраженного и проходящего пучков при градиенте наблюдается также и на свежих образцах АДП (NH<sub>4</sub>H<sub>2</sub>PO<sub>4</sub>), КДП (KH<sub>2</sub>PO<sub>4</sub>), также состоящих из легких атомов, и на других кристаллах.



Рис.1. Поведение падающей квазиплоской волны при отражении и прохождении от исследуемого кристалла кварца в геометрии Лауэ при внешнем воздействии. а) Ка, и Ка, линии молибдена, отраженные от кристалла-монохроматора кварца и проходящие через исследуемую кварцевую пластинку (t = 1мм) в геометрии Лауэ при наличии температурного градиента на образце. Отражение на монохроматоре и на исследуемом кристалле производилось от плоскостей (1011), (1, +1). На исследуемом кристалле отражение производилось от линии Мо Ка, поэтому центральная область по вертикали только у этого пучка (справа) отсутствует (пучок переброшен в направление отражения). б) проходящий (п) и отраженный (о) Мо К<sub>в</sub> пучки. В качестве монохроматора служил Ge с толщиной t = 0,3мм (µt > 10). На проходящем пучке (п) видны только следы частей лентообразного пучка, которые не проходили через образец и, естественно, не отражались. Следы кристалла как на проходящем, так и на отраженном пучках, указаны стрелками одинаковой величины. На проходящем пучке виден косой след падающего пучка, обусловленного нестрого вертикальной ориентацией атомных плоскостей отражающего кристалла кварца.

Вышеизложенные обстоятельства заставляют предположить, что внутри кристаллов происходят иные, ныне не полностью известные

процессы, и увеличение интенсивности отраженного пучка может происходить лишь тогда, когда интенсивность отражения определяется также и другими факторами – другими системами зарядов, скажем, диполями, моменты которых могут изменяться под воздействием внешних сил, приложенных к монокристаллу. Причем эти системы зарядов, повидимому, могут изменяться, приобретая разнообразные конфигурации, и, следовательно, величины дипольных моментов могут изменяться в очень широких пределах, и, соответственно этому, рассеянная энергия может изменяться в широких пределах, что, собственно, и наблюдается в реальных экспериментах последних лет [12,13,15].

Если в случаях пьезоэлектрических и сегнетоэлектрических кристаллов (кварц, КДП, АДП и др.) интенсивность рассеянного излучения изменяется очень легко – при меньших величинах деформации, то в случае кристаллов с центром симметрии эта реакция наблюдается при более высоких градиентах. Большие изменения интенсивностей дифрагированных пучков – до 7 раз и более (согласно результатам пока неопубликованных работ), наблюдались при градиенте также и на других кристаллах: сапфир (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>), NaCl, KCl, LiF, кальцит (CaCO<sub>3</sub>),, кремний (Si) и т.д. Многократное увеличение интенсивности наблюдается также и при стыковке исследуемого непьезоэлектрического кристалла с пьезоэлектрическим резонатором, как это осуществлено в работе [16].

В случае пьезоколебания внутри кристалла трудно ожидать таких градиентов межплоскостных расстояний, какие возникают при градиенте температуры, или же появления существенной мозаичности. Такие эффекты (мозаичность,  $\Delta d/\Delta x$ ), по-видимому, невозможно обнаружить также при приложении постоянного электрического поля на металлических обкладках, нанесенных на плоский образец кварца, как это было выполнено в работе [17]. Результаты этой работы показывают также, что отнесение увеличения интенсивности дифрагированного пучка за счет увеличения угловой области этого пучка необоснованно, а появление у такого образца дипольного момента молекул или других агрегатов очевидно, т.к. изолятор находится в сильном постоянном электрическом поле. Здесь также увеличение интенсивности отраженного пучка можно объяснить влиянием совокупности образующихся диполей в образце.

В динамической теории, развитой, в частности, Лауэ [1,18], предполагается, что под действием электромагнитной волны рентгеновского волнового поля в объеме кристалла происходит смещение отрицательных зарядов, и, следовательно, наблюдается некоторая поляризация и возникает возмущенная электронная плотность. Электромагнитное волновое поле в кристалле связано с распространением этого возмущения, и оно описывается законами электродинамики, т.е. с помощью уравнений Максвелла.

Поскольку динамическая теория, основанная на таком предположении, дает ответы на множество вопросов, то путем таких рассуждений и может быть достигнуто объяснение увеличения интенсивности дифрагированного рентгеновского излучения и полной переброски рентгеновских лучей при наличии внешних воздействий. При наличии градиента можно предположить, что до действия рентгеновского волнового поля в объеме кристалла уже имелись сильносмещенные и регулируемые в широких пределах зарядовые системы в виде диполей или других форм распределения зарядов, под действием которых процесс рассеяния усиливается, и поэтому сильно увеличивается отражательная способность атомных плоскостей,

Поскольку интенсивность рассеяния диполей зависит от квадрата второй производной дипольного момента  $J \sim f(P''^2)$ , то естественно ожидать сильного и монотонного увеличения интенсивности дифрагированного пучка до его достижения величины интенсивности проходящего пучка. Насыщение отраженного пучка обусловлено отсутствием проходящего пучка при некоторых величинах внешних воздействий. Примерно такая же зависимость и получается при внешних воздействиях (см. рис.2 в работе [12]). Необходимо отметить еще одно существенное обстоятельство. Дело в том, что сильное рассеяние (отсутствие проходящего пучка) наблюдается при выполнении условия Брэгта. Несмотря на то, что и вне условия Брэгта действуют (рассеивают) те же атомы данного вещества (облученный объем не меняется), тем не менее градиент очень мало влияет на величину интенсивности проходящего пучка (наблюдается незначительное уменьшение). Последнее говорит о том, что процесс полного рассеяния (полной переброски) представляет собой сугубо дифракционный процесс, во время которого исключается рассеяние под другими углами наблюдения, даже по направлению прохождения, для которого условие Брэгта все еще продолжает сохраняться.

#### ЛИТЕРАТУРА

- Р.Джеймс. Оптические принципы дифракции ренттеновских лучей. М., ИЛ, 1950.
- 2. G.W.Fox, P.H.Carr. Phys. Rev., 87, 1622 (1931).
- 3. J.Sakisaka, I.Sumoto. Proc. Math.-Phys. Soc. (Japan), 13, 211 (1931).
- 4. S.Nishikawa, J.Sakisaka, I.Sumoto. Phys. Rev., 38, 1078 (1931).
- 5. G.W.Fox, W.A.Frazer. Phys. Rev., 47, 899 (1931).
- 6. K.Haruta. J. Appl. Phys., 38, 3312 (1967).
- М.А.Навасардян, Р.К.Караханян, П.А.Безирганян. Кристаллография, 15, 235 (1970).
- 8. М.А.Навасардян, П.А.Безирганян. Кристаллография, 17, 473 (1972).
- 9. М.А.Навасардян, П.А.Безирганян. Изв. АН Арм. ССР, Физика, 8, 108 (1973).
- A.G.Klein, P.Prager, H.Wagenfeld, P.J.Ellis, T.M.Sabina. Appl. Phys. Lett., 10, 293 (1967).
- 11. W.J.Spencer, G.T.Pearman. Advances in X-Ray Analysis, 13, 503 (1970).
- 12. А.Р.Мкртчян, М.А.Навасардян, В.К.Мирзоян. Письма в ЖТФ, 8, 677 (1982).
- А.Р.Мкртчян, М.А.Навасардян, С.С.Галстян, В.К.Мирзоян, С.С.Тигранян, Р.Г.Габриелян. В кн. "Субструктуры упругих материалов и дифракционные методы исследований", Киев, 1985, с.232.
- 14. M.Kuriyama, T.Miyakawa. J. Appl. Phys., 40, 1967 (1969).
- А.Р.Мкртчян, М.А.Навасардян, В.К.Мярзоян. Изв. АН Арм. ССР, Физика, 21, 340 (1986).
- 16. М.А.Навасардян, П.А.Безирганян, К.Т.Айрапетян, С.С.Галстян. АС СССР №1642933, 1990.

- Е.Г.Лапин, В.М.Самсонов, Г.П.Солодов, О.И.Сумбаев, А.В.Тюнис. ЖЭТФ, 73, 1016 (1977).
- M.Laue. Röntgenstrahlinterferenzen. Frankfurt/M., Akademische Verlagsgeselschaft, 1960.

# ԿԱՏԱՐՅԱԼ ՄԻԱԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐՈՒՄ ԱՐՏԱՔԻՆ ՆԵՐԳՈՐԾՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ՊԱՅՄԱՆՆԵՐՈՒՄ ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՃԱՌԱԳԱՅԹՆԵՐԻ ՑՐՄԱՆ ՊՐՈՅԵՄՈՒՄ ԷԼԵԿՏՐՈՆՆԵՐԻ ԴԵՐԻ ՆՎԱՉՈՒՄԸ

#### Մ. Ա. ՆԱՎԱՍԱՐԴՅԱՆ, Ռ. Ց. ԳԱԲՐԻԵԼՅԱՆ

Նախկինում կատարված աշխատանքների վերլուծությունը և քվազիհարթ ալիքների կիրառման դեպքերի քննարկումը քերում է այն եզրակացության, ըստ որի, երբ թյուրեղների վրա կիրառվում են ջերմային գրադիենտի տիպի արտաքին ներգործություններ, ապա ցրված ճառագայթների ինտենսիվությունը չի որոշվում էլեկտրոնների թվով, քանի որ նույնիսկ փոքր կարգաթիվ ունեցող ատոմներից կազմված բյուրեղը ի վիճակի է ցրել ընկնող փունջը (լրիվ վերամղում)։ Յրման գործում մեծ դեր է վերագրվում մասնավորապես դիպոլներին, որոնք կարող են առաջանալ բյուրեղի դեֆորմացիաների ժամանակ։

# REDUCED ROLE OF ELECTRONS IN THE PROCESS OF SCATTERING OF X-RAYS BY PERFECT SINGLE CRYSTALS UNDER THE EXTERNAL INFLUENCE

#### M. A. NAVASARDIAN, R. Ts. GABRIELIAN

Based on what has already been published, and considering the applicability of quasiplane waves, it is proposed that in the process of scattering of X-rays by externally affected perfect single crystals electrons do not play the basic role, since the crystals consisting of atoms with small number of electrons scatter the propagating X-radiation completely in the direction of diffraction (total transfer). The determining role in the scattering process is attributed to dipols or other configurations of charge systems arising in externally affected crystals.

· de

1.14.50

# ԲՈՎԱՆԴԱԿՈՒԹՅՈՒՆ

Ա.Ժ.Մութադյան, Ա.Մ.Սեդրակյան. Երկմակարդականի ատոմի սպոնտան ճա- ոագայթումը հագնված վիճակից քվանտացված մոնոքրոմատային ճառա-	-
ՅուՀ.Ավետիսյան, Ա.Ժ.Բաբաջանյան, Կ.Ն.Քոչարյան, Խ.Վ.Ներկարարյան. Օպտիհական ասիրապոստներում տարրիրային համակարարյան	67
ոագայթման Չերենկովյան մեխանիզմը	75
Գ.Յ.Ներսիսյան, Վ.О.Պապանյան, Կ.Մ.Փոխարարյան. Ածխածնի և ալյումինի լազերային պազմայի ուսումնասիրությունը սպեկտրի ՎՈՒՄ տիրույթում	81
Ա.Ա.Ավետիսյան, Ա.Պ.Ջոթյան, Բ.Ժ.Պողոսյան. Լույսի միջգոտիական կլանումը նեղ արգելված գոտիով կիսահաղորդչային թաղանթներում՝ խաչված էլեկ- արական և մաջնիսական ռաշտերում.	87
Ա.Լ.Ասատրյան. Էլեկտրոնի ցրումը սահմանափակ և միջմակերևութային բևե- ռային օատիկական ֆոնոնների վրա քվանտային լարում	92
Ե.Մ.Հարությունյան, Ա.L.Քոչարյան, Լ.Ա.Քոչարյան, Գ.Ա.Հարությունյան. Ցրման	
Մյոսբաուէրյան սպեկտրի ձևը կոհերենտ գերձայնով մոդուլման դեպքում. Ա.Վ.Հովսեսեսան Դ.Վ Ռայաստն Միշուկային ռեակարորում ոչ առաշիրնար արդ-	98
ghulibph huguduphh úbpan.	103
ա.a.o.umpaujuti 4.4.4.umpautijuti, 2.4.14unpauumpjuti, 0.0.5 ujinjuti. 11pn2 խիրալային ավելցուկներով սմեկտիկ մատրիցների հեղուկ բյուրեղական	
համակարգերի փուլային անցումների հետազոտությունը	109
Մ.Ա.Նավասարդյան, Ռ.Յ.Գաբրիելյան. Կատարյալ միաբյուրեղներում արտա- քին ներգործությունների պայմաններում ռենտգենյան ճառագայթների	
ցրման պրոցեսում էլեկտրոնների դերի նվազումը	119

# CONTENTS

A.Zh.Muradyan, A.M.Sedrakyan. Spontaneous emission of two-level atom	
from a dressed state in the quantized monochromatic radiation field	67
Y.H.Avetisyan, A.J.Babadjanyan, K.N.Kocharyan, Kh.V.Nerkararyan. Cherenkov mechanism of difference frequency propagation by optical	
waveguides	75
G.Ts.Nersisyan, V.O.Papanyan, K.M.Pokhsraryan. Carbon and	81
A.A.Avetisyan, A.P.Djotyan, B.G.Poghosyan. Interband absorption of light in thin films of semiconductors with a narrow forbidden band in crossed	01
electric and magnetic fields.	87
A.L.Asatrian. Scattering of electron by confined and interface PO-phonons	02
E.M.Harutyunyan A.I.Kocharian I.A.Kocharian G.A. Harutyunyan	92
Mössbauer scattering spectrum shape in the presence of modulation by	
A V Howsenven DV Deveven Non-stationary processes calculation	98
method for the simulation of nuclear reactor.	103
A.Ts.Sarkissyan, K.K.Vartanyan, Z.V.Baghdasaryan, S.M.Yayloyan. Investigation of phase transitions in some liquid crystal systems of	
smectic matrixes with chiral addings.	109
M.A.Navasardian, R.Ts.Gabrielian. Reduced role of electrons in the process of scattering of X-rays by perfect single crystals under the	
external influence.	119

# СОДЕРЖАНИЕ

А.Ж.Мурадян, А.М.Седракян. Спонтанное излучение из одетого состояния двухуровневого атома в квантованном поле моно-	
хроматического излучения	67
Ю.О.Аветисян, А.Ж.Бабаджанян, К.Н.Кочарян, Х.В.Неркарарян. Черенковский механизм излучения разностной частоты	75
оштических волноводов	15
Г.Ц.Нерсисян, В.О.Папанян, К.М.Похсрарян. Исследование лазер- ной плазмы углерода и алюминия в ВУФ области спектра	81
А.А.Аветисян, А.П.Джотян, Б.Г.Погосян. Межзонное поглощение света в тонких полупроводниковых пленках с узкой запрещен-	
ной зоной в скрещенных электрическом и магнитном полях	87
А.Л.Асатрян. Рассеяние электрона на ограниченных и интерфейс-	
ных ПО-фононах в квантовых проволоках	92
Э.М.Арутюнян, А.Л.Кочарян, Л.А.Кочарян, Г.А.Арутюнян. Форма мессбауэровского спектра рассеяния при модуляции когерент-	
ным ультразвуком.	98
А.В.Овсепян, Д.В.Райсян. Метод расчета нестационарных процес-	
сов в ядерном реакторе	103
А.Ц.Саркисян, К.К.Варданян, З.В.Багдасарян, С.М.Яйлоян. Иссле-	
дование фазовых переходов некоторых жидкокристаллических систем смектических матриц с хиральными добавками	109
М.А.Навасардян, Р.Ц.Габриелян. Пониженная роль электронов в процессе рассеяния рентгеновских лучей совершенными мо-	
нокристаллами при внешних возлействиях.	110

# Отпечатано на копи-принтере Rex Rotary CP1280 фирмы RICOH

Заказ №9. Тираж 200. Сдано в набор 4.03.99. Подписано к печати 12.04.99. Печ. л. 4. Бумага КҮМ-ultra. Цена договорная.

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