ISSN 0002-3035

ФИЗИКА · ՖԻԶԻԿԱ · PHYSICS

ИЗВЕСТИЯ
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК АРМЕНИИ

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ
ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ

PROCEEDINGS
OF NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF ARMENIA

34 №5, 1999

Индекс 77709

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

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.

ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱ

НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК АРМЕНИИ

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ ИЗВЕСТИЯ

ՖԻԶԻԿԱ ФИЗИКА

ՀԱՏՈՐ ТОМ

34

№ 5

ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ԳԱԱ ՀՐԱՏԱՐԱԿՉՈՒԹՅՈՒՆ ИЗДАТЕЛЬСТВО НАН АРМЕНИИ

ԵՐԵՎԱՆ ЕРЕВАН

1999

Известия НАН Армении, Физика, т.34, №5, с.259-265 (1999)

УДК 539.182

ДИФРАКЦИЯ АТОМОВ НА СТОЯЧЕЙ ВОЛНЕ ПРИ ГАУССОВОМ НАЧАЛЬНОМ РАСПРЕДЕЛЕНИИ АМПЛИТУД ПО ИМПУЛЬСАМ

А.М. ИШХАНЯН

Инженерный центр НАН Армении

(Поступила в редакцию 30 марта 1999 г.)

Рассмотрена роль приготовления начального состояния в процессе когерентной дифракции атомов в поле стоячей волны. Показано, что эволюция во времени атомного волнового пакета с гауссовым начальным распределением амплитуд по импульсам, благодаря конструктивной квантовомеханической интерференции, происходит практически без изменения первоначальной гауссовой формы. При этом, в зависимости от фаз компонент начального импульсного распределения, приращение импульса атома может варьироваться от максимально возможного (определяемого предельной скоростью вынужденных актов переизлучения фотонов) до нуля. Следовательно, стоячая волна для гауссовых атомов является эффективным зеркалом с управляемым углом отражения.

1. В последнее время обнаружен ряд необычных эффектов, происходящих при когерентном рассеянии атомов в поле стоячей волны, которые не укладываются в установившиеся представления (см., например, [1]) о дифракции атомов стоячими волнами. Например, было показано, что картина дифракции может быть сильно асимметричной [2] и осцилляционной (в зависимости от расстройки частоты поля) [3]. Другим нетривиальным примером является сужение хорошо известных интерференционных крыльев дифракции, которое может иметь место как при симметричном, так и при асимметричном рассеянии [4].

Перечисленные аномалии обязаны своим происхождением приготовлению атомов в специфических состояниях перед рассеянием на стоячей волне, а именно, начальному расщеплению атомного волнового пакета в импульсном пространстве. Согласно концепции аномального рассеяния, сформулированной в строгом виде впервые в [3], механизмом возникновения нетривиальных особенностей в картине рассеяния в поле некоторой внешней волны (не только стоячей) является конструктивная квантовомеханическая интерференция (происходящая в процессе дифракции) между различными наборами дифракционных пиков, берущих свое происхождение от отдельных импульсных пиков начального волнового пакета атома.

Концептуально, начальное расщепление волнового пакета можно осуществить множеством различных способов. В простейшем случае расщепления всего на два пика, отличающихся одним импульсом фотона, можно добиться предварительным возбуждением атомов бегущей волной (такая ситуация автоматически имеет место, например, в тех экспериментах, в которых рассеивающая стоячая волна образуется отражением светового импульса от зеркала [5]).

Последовательно воздействуя на атом несколькими противоположно бегущими импульсами бегущих волн, можно, в принципе, расщепить атомный волновой пакет на произвольное число импульсных пиков. В качестве подобного начального приготовления атомов можно применить также само обычное рассеяние стоячей волной, расщепив, тем самым, волновой пакет на множество пиков. Характерно, что дальнейшее рассеяние приготовленных таким образом атомов полем теперь уже бегущей волны также приводит к типичным интерференционным особенностям, таким, как асимметрия, осцилляции и т. д. [6].

Сделанные выше замечания указывают на необходимость целенаправленного изучения различных типов предварительного расщепления атомного волнового пакета (впрочем, как и типов рассеивающих впоследствии полей) для определения, как минимум, круга всевозможных эффектов приготовления начального состояния. В свете сказанного, можно ожидать, что эти эффекты будут разнообразны, что в свою очередь позволяет надеяться, что подобное гибкое управление атомным движением световыми полями найдет в будущем плодотворные применения в различных прикладных ситуациях.

В настоящей работе мы изучаем роль начального распределения амплитуд населенностей по импульсам при рассеянии в поле стоячей волны на примере гауссового распределения. Как будет показано ниже, подобное начальное распределение, в силу специфических внутренних свойств данного распределения, приводит к рассеянию атомов практически без изменения формы волнового пакета, т.е. практически без характерного дифракционного расплывания пакета. Таким образом, гауссовый атомный волновой пакет в поле стоячей волны ведет себя приблизительно как нераспадающаяся квазичастица. При этом, в зависимости от фаз компонент начального импульсного распределения поглощенное атомом количество фотонов может варьироваться от максимально возможного (определяемого предельной скоростью вынужденных актов переизлучения фотонов) до нуля. Следовательно, когерентная дифракция гауссовых волновых пакетов представляет собой преломление на определенный, управляемый в широких пределах, угол. Иными словами, можно сказать, что стоячая волна для гауссовых атомов является эффективным зеркалом с управляемым углом отражения.

2. Как показано в [4], решение задачи когерентной дифракции двухуровневых атомов в поле стоячей волны $E = 2E_0\cos(kz)\cos(\omega t)$ при точном резонансе в приближении малых времен взаимодействия Рамана-Ната для общих начальных условий

$$a_1(0) = \sum_m \alpha_{2m} e^{i2mkz} \cdot \varphi(z),$$
$$a_2(0) = \sum_m \beta_{2m+1} e^{i(2m+1)kz} \cdot \varphi(z), \qquad m \in (-\infty, +\infty), \quad (1)$$

где $a_{1,2}$ – амплитуды вероятностей уровней, записывается, при условии резкого включения взаимодействия, в виде

$$a_{1,2}(t)=\sum_n i^n \frac{\pm 1+(-1)^n}{2}\left(\sum_m i^m s_m J_{n-m}(2Ut)\right)\cdot\delta(p-p_0-n\hbar k)\,, \qquad (2)$$

где U – пиковая частота Раби бегущей волны, p_0 – начальный импульс атома и s_m – начальный вектор импульсного состояния, определенный как $s_m=\alpha_m+\beta_m$.

Соответствующая вероятность поглощения n фотонов

$$W_n(t)=\left|\sum_m i^m s_m J_{n-m}(2Ut)\right|^2, \qquad (3)$$

как видно непосредственно, имеет типичную интерференционную структуру, порождающую, как было отмечено, ряд аномалий.

Асимметричное рассеяние получается, когда $a_1(0)$ и $a_2(0)$ имеют только два ненулевых пика в импульсном пространстве, отличающихся на *нечетное* число импульсов фотона [2]. Например, когда ненулевыми компонентами s_m являются только $s_0=\alpha_0$ и $s_1=\beta_1$, имеем:

$$W_n(t)=\left|\alpha_0 J_n+i\beta_1 J_{n-1}\right|^2=\begin{cases}\left|\alpha_0\right|^2 J_n^2+\left|\beta_1\right|^2 J_{n-1}^2+2\,\mathrm{Im}(\alpha_0\beta_1^*)J_nJ_{n-1}, & n>0,\\ \left|\alpha_0\right|^2 J_n^2+\left|\beta_1\right|^2 J_{n+1}^2-2\,\mathrm{Im}(\alpha_0\beta_1^*)J_nJ_{n+1}, & n<0.\end{cases} \qquad (4)$$

Когда же единственные два пика начального волнового пакета отличаются *четным* числом импульсов фотона, возникает сужение интерференционных крыльев дифракционной картины [4]. Например, когда отличны от нуля только $s_{-1}=\beta_{-1}$ и $s_1=\beta_1$, то при условии $\beta_{-1}=-\beta_1$ получается:

$$W_n(t)=\left|-\beta_{-1}J_{n+1}(2Ut)+\beta_1 J_{n-1}(2Ut)\right|^2=\left|\beta_1\right|^2\left(\frac{n}{Ut}\right)^2 J_n^2(2Ut)\,. \qquad (5)$$

Рассмотрим теперь начальный вектор состояний, задающий гауссовое распределение по импульсам:

$$s_m=e^{i(\alpha-\frac{\pi}{2})m}\cdot\frac{1}{\sqrt[4]{\pi M}}e^{-\frac{m^2}{2M}}, \qquad (6)$$

где параметр M определяет полуширину распределения, а α задает фазу компонент.

Перепишем решение (2) дифракционной задачи в виде

$$W_n=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left|e^{i\alpha n}\sum_{-\infty}^{+\infty}e^{-i\alpha\nu-\frac{(n-\nu)^2}{2M}}\cdot\frac{1}{\sqrt[4]{M}}J_\nu(2Ut)\right|^2\equiv\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left|e^{i\alpha n}I_n\right|^2. \qquad (7)$$

Качественный вид функции I_n легко установить, заметив, что она удовлетворяет следующему рекуррентному соотношению:

$$\frac{dI_n}{dn} = -\frac{n}{M} I_n + \frac{u}{2M}\left[e^{i\alpha} I_{n+1} + e^{-i\alpha} I_{n-1}\right], \quad u = 2Ut\ . \qquad (8)$$

Разложив $I_{n\pm1}$ в ряд Тейлора в точке n и сохранив лишь первые два члена, получим уравнение

$$\frac{dI_n}{dn} \approx -\frac{n}{M} I_n + \frac{u}{M}\left(\cos\alpha \cdot I + i\sin\alpha \frac{dI}{dn}\right), \qquad (9)$$

решение которого и задает искомый вид функции I_n в первом приближении:

$$I_n \approx \frac{e^{-in\pi/2}}{\sqrt[4]{\pi(M - i\sin\alpha \cdot 2Ut)}} \cdot e^{-\frac{(n-\cos\alpha\cdot 2Ut)^2}{2(M-i\sin\alpha\cdot 2Ut)}}\ . \qquad (10)$$

Освободившись от комплексности в знаменателях дробей, для вероятности n-го дифракционного порядка окончательно получим:

$$W_n \approx \frac{1}{\sqrt{\pi M(1+\sin^2\alpha\cdot(2Ut/M)^2)}} \cdot e^{-\frac{(n-\cos\alpha\cdot 2Ut)^2}{M(1+\sin^2\alpha\cdot(2Ut/M)^2)}}\ . \qquad (11)$$

Как видно из полученного выражения, форма распределения в процессе эволюции все время остается гауссовой, перемещаясь в импульсном пространстве, если $\cos\alpha \neq 0$, и уширяясь, если $\sin\alpha \neq 0$. Кроме того, примечательной чертой эволюции гауссового распределения является то, что и величина перемещения положения пика, и уширение распределения определяются временем взаимодействия с полем и происходят в противофазе.

При $\alpha = \pi/2 \pm \pi k$, $k=0,1,2,\ldots$ уширение максимально, но пик распределения никак не перемещается: происходит лишь быстрое расплывание распределения. Однако при $\alpha = \pm\pi k$, $k=0,1,2,\ldots$ уширение в первом приближении отсутствует и распределение в целом только перемещается. Расстояние перемещения пика прямо пропорционально площади огибающей бегущей волны, $2Ut$, определяющей максимальное число актов вынужденного переизлучения фотонов при взаимодействии с полем стоячей волны. Видно, что направление перемещения пиков определяется только знаком множителя $\cos\alpha$, т.е. значением фазового параметра α начального распределения (6).

Указанные особенности поведения атомов с гауссовым начальным распределением по импульсам при дифракции стоячей волной проиллюстрированы на рис.1 и 2, где приведенные графики вычислены по точному выражению (7). Как видно из рис.2, при перемещении пика тем не менее имеется небольшое отклонение от точной гауссовой формы: у крыла, близкого к началу координат, с течением времени возникают характерные интерференционные осцилляции. Кроме того, видно, что имеют место постепенное уширение распределения и уменьшение ее амплитуды.

Эти особенности выявляются уже в следующем приближении уравнения (8):

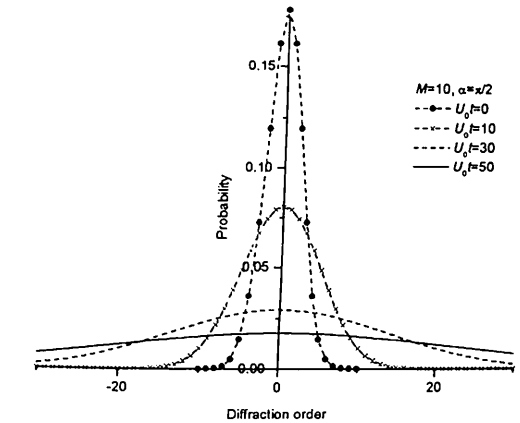


Рис.1. Эволюция во времени атомного волнового пакета с гауссовым начальным распределением амплитуд по импульсам (M=10) в поле стоячей волны при $\alpha = \pi/2$ (перемещение отсутствует, уширение волнового пакета максимально).

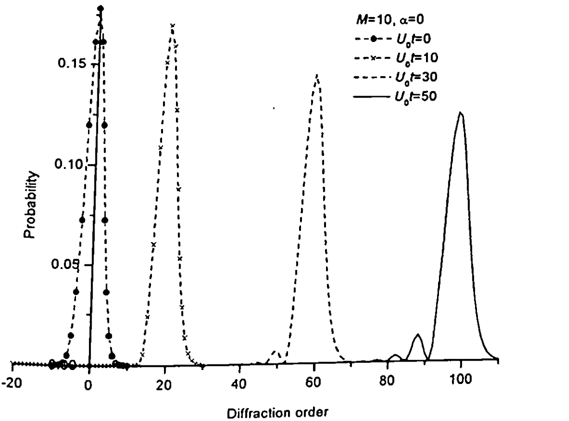


Рис.2. Эволюция во времени атомного волнового пакета с гауссовым начальным распределением амплитуд по импульсам (M=10) в поле стоячей волны при α = 0 (минимальное уширение волнового пакета).

$$\frac{dI_n}{dn} \approx -\frac{n}{M} I_n + \frac{u}{M}\left(\cos\alpha \cdot \left[I + \frac{1}{2}\frac{d^2 I}{dn^2}\right] + i\sin\alpha \frac{dI}{dn}\right), \tag{12}$$

которое заменой

$$I_n = e^{hN} y, \quad N = \left(\frac{2}{\cos\alpha \cdot u}\right)^{1/3} \cdot (n - \cos\alpha \cdot u), \quad h = \frac{M - i\sin\alpha \cdot u}{(2\cos\alpha \cdot u)^{2/3}} \tag{13}$$

сводится к уравнению Эйри:

$$\frac{d^2 y}{dN^2} - (N + h^2) y = 0\,. \tag{14}$$

Следовательно, решение дифракционной задачи, конечное при $n \to \pm\infty$, выражается через функцию Эйри первого рода:

$$I_n = I_{00} e^{hN} \mathrm{Ai}(N + h^2)\,, \tag{15}$$

где постоянная I_{00} определяется из условия нормировки.

Так как поведение функции Эйри при $N+h^2<0$ осцилляционное, а при $N+h^2>0$ экспоненциально падающее, то видно, что, действительно, у крыла, близкого к началу координат, имеются осцилляции. В начале дифракции, когда h большое, они подавляются множителем e^{hN}, но с течением времени, из-за уменьшения h, проявляются.

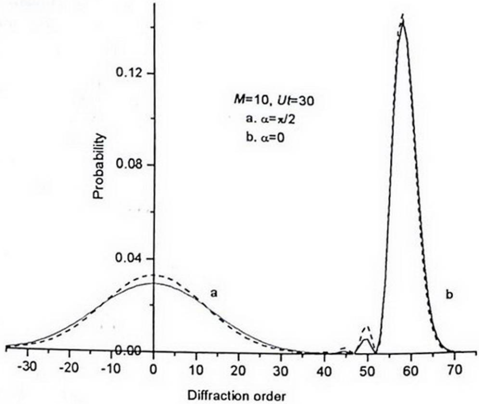


Рис.3. Сравнение приближенной формулы (15) (пунктирная линия) и точного решения (7) (непрерывная линия).

Сравнение формулы (15) и точного решения (7) приведено на рис.3. Отметим, что точность полученной формулы во всем диапазоне изменения параметров задачи составляет несколько процентов.

Таким образом, мы показали, что эволюция атомного волнового пакета с гауссовым начальным распределением амплитуд населенностей по импульсам, благодаря конструктивной квантовомеханической интерференции, происходит практически с сохранением гауссовой формы.

В случае, когда уширение распределения почти отсутствует, дифракция атомов, движущихся перпендикулярно стоячей волне, эквивалентна преломлению на определенный угол, управляемый временем взаимодействия со световым полем. Мы надеемся, что последнее обстоятельство может быть использовано при создании эффективных атомных зеркал, применяемых в атомной оптике.

Автор выражает благодарность А.Ж.Мурадяну за полезные замечания.

Работа выполнена при поддержке грантов NATO No.CRG.CRG 974301 и PA No. 98-740.

ЛИТЕРАТУРА

1. **А. П.Казанцев, Г.И.Сурдутович, В.П.Яковлев.** Механическое действие света на атомы. М., Наука, 1991.
2. **А.М.Ишханян.** Известия НАН Армении, Физика, **32**, 3 (1997).
3. **A.M.Ishkhanyan.** Laser Physics, 7, 1225 (1997).
4. **А.М.Ишханян.** Известия НАН Армении, Физика, **34**, 131 (1999).
5. **G.A.Ryabenko, V.A.Grinchuk, I.A.Grishina**, et al. Laser Physics, **6**, 150 (1996).
6. **А.Ж.Мурадян, А.Л.Арутюнян.** Доклады НАН Армении, **99** (1999) (в печати).

ԱՏՈՄՆԵՐԻ ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՆ ԿԱՆԳՈՒՆ ԱԼԻՔԻ ԴԱՇՏՈՒՄ ԱՄՊԼԻՏՈՒԴՆԵՐԻ ՍԿԶԲՆԱԿԱՆ ԳԱՈՒՍՅԱՆ ԻՄՊՈՒԼՍԱՅԻՆ ԲԱՇԽՄԱՆ ԴԵՊՔՈՒՄ

Ա. Մ. ԻՇԽԱՆՅԱՆ

Դիտարկված է սկզբնական վիճակի նախապատրաստման դերը կանգուն ալիքի դաշտում ատոմների կոհերենտ դիֆրակցիայի պրոցեսում: Ցույց է տրված, որ սկզբնական գաուսյան իմպուլսային բաշխվածությամբ ատոմական ալիքային փաթեթի էվոլյուցիան ժամանակի ընթացքում կոնստրուկտիվ քվանտամեխանիկական ինտերֆերենցիայի շնորհիվ ընթանում է գործնականում առանց սկզբնական գաուսյան ձևի փոփոխության: Ընդ որում, կախված սկզբնական իմպուլսային բաշխվածության բաղադրիչների փուլերից, ատոմի իմպուլսի մեծացումը կարող է փոփոխվել առավելագույն հնարավորից (որը որոշվում է ֆոտոնների հարկադրական ճառագայթման ակտերի սահմանային արագությամբ) մինչև զրո: Հետևաբար, կանգուն ալիքը գաուսյան ատոմների համար հանդիսանում է արդյունավետ հայելի՝ անդրադարձման ղեկավարելի անկյամբ:

DIFFRACTION OF ATOMS BY A STANDING WAVE AT GAUSSIAN INITIAL MOMENTUM DISTRIBUTION OF AMPLITUDES

A.M. ISHKHANYAN

The role of the initial state preparation in the coherent diffraction of atoms in the field of a standing wave is considered. It is shown that the time evolution of the atomic wave packet with a Gaussian initial momentum distribution of amplitudes, due to the constructive quantum-mechanical interference, occurs practically without transformation of the initial Gaussian form. Depending on the phases of the initial momentum distribution components, the increment of the atomic momentum can vary from the maximum possible amount (determined by the limiting speed of stimulated photon re-emission acts) to zero. Consequently, for Gaussian atoms the standing wave presents an effective mirror with controllable reflection angle.

Известия НАН Армении, Физика, т.34, №5, с.266-271 (1999)

УДК 538.61

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДВУХУРОВНЕВОГО АТОМА С ПОЛЕМ НЕМОНОХРОМАТИЧЕСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ВНЕ РАМОК РЕЗОНАНСНОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ

Г.Г. ГРИГОРЯН, Е.Т. ПАШАЯН, В.О. ЧАЛТЫКЯН

Институт физических исследований НАН Армении

(Поступила в редакцию 4 марта 1999 г.)

Без резонансного приближения рассмотрена задача о двухуровневом атоме в поле немонохроматического импульса. Используя нестационарную теорию возмущений, получены аналитические выражения для вероятности перехода атома. Оценена степень точности вычислений в зависимости от интенсивности поля и расстройки резонанса. Показано, что в населенности верхнего уровня атома имеются дополнительные осцилляции, которые отсутствуют в резонансном приближении.

1. Введение

Взаимодействие двухуровневого атома с немонохроматическим излучением достаточно подробно исследовано на сегодняшний день в резонансном приближении в двух предельных случаях (см., например, [1-3] и цитируемую там литературу) : для спектрально-ограниченных импульсов при $\Delta T << 1$ и для адиабатических импульсов при $\Delta T >> 1$, где Δ – расстройка резонанса, T – длительность импульса. В случае произвольных расстроек точные аналитические решения известны только для ограниченного числа конкретных форм импульса [4-8].

Все вышеприведенные исследования проводились в резонансном приближении. Однако в настоящее время разработано много систем, генерирующих очень короткие оптические импульсы, длительностью в несколько периодов колебания, которые интенсивно применяются для исследования различных атомных или молекулярных сред [9-11]. При рассмотрении взаимодействия подобных импульсов с атомами резонансное приближение неприменимо и поэтому большой интерес представляет рассмотрение задачи без резонансного приближения. Приближение двухуровневого атома, вообще говоря, также неприменимо для очень коротких импульсов в том случае, если спектр импульса содержит частоты атомных переходов на несколько уровней. В настоящей работе мы предполагаем, что импульс имеет спектральную ширину, позволяющую применить модель двухуровневого атома, но рассматриваем проблему без резонансного приближения. В работе приведены основные уравнения и метод их решения, вычисляется вероятность перехода во втором порядке теории возмущений и проводится сравнение вероятности перехода, вычисленной в резонансном приближении и без него.

2. Теория возмущений

Поведение двухуровневого атома в поле импульса, длительность которого много меньше всех времен релаксаций, описывается нестационарным уравнением Шредингера:

$$\begin{aligned} \dot{a}_1 &= -i\dot{S}^* a_2, \\ \dot{a}_2 &= -i\dot{S}\, a_1, \end{aligned} \tag{1}$$

где $a_1(t)$, $a_2(t)$ – коэффициенты разложения искомой волновой функции атома в поле по волновым функциям невозмущенного атома, $\dot{S}$ – производная от функции

$$S = \int_{-\infty}^{t} V(t') e^{i\omega_{21}t'} dt'. \tag{2}$$

Входящая в (2) величина $V(t)$ определяет взаимодействие поля излучения с напряженностью электрического поля $\mathbf{E}$ с двухуровневым атомом, $V(t) = -\dfrac{\mathbf{Ed}}{\hbar}$, где $\mathbf{d}$ – дипольный момент перехода двухуровневого атома, ω_{21} – частота этого перехода.

Будем считать, что атом до взаимодействия находился в основном состоянии, что соответствует начальным условиям

$$a_1(-\infty) = 1, \quad a_2(-\infty) = 0\,. \tag{3}$$

Используя процедуру нестационарной теории возмущений [12], для уравнений (1) можно построить следующие ряды:

$$\begin{aligned} a_1(t) &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \int_{-\infty}^{t} \dot{S}^* dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} \dot{S} dt_2 \cdots \int_{-\infty}^{t_{2n-1}} \dot{S} dt_{2n}, \\ a_2(t) &= i \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \int_{-\infty}^{t} \dot{S} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} \dot{S}^* dt_2 \cdots \int_{-\infty}^{t_{2n-2}} \dot{S} dt_{2n-1}. \end{aligned} \tag{4}$$

Аналогично, для начальных условий $a_1(-\infty) = 0$, $a_2(-\infty) = 1$ (которые означают, что до взаимодействия атом находился в возбужденном состоянии) получим

$$\begin{aligned} a_1(t) &= i \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \int_{-\infty}^{t} \dot{S}^* dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} \dot{S} dt_2 \cdots \int_{-\infty}^{t_{2n-2}} \dot{S}^* dt_{2n-1}, \\ a_2(t) &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \int_{-\infty}^{t} \dot{S} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} \dot{S}^* dt_2 \cdots \int_{-\infty}^{t_{2n-1}} \dot{S}^* dt_{2n}. \end{aligned} \tag{5}$$

Для того, чтобы ряды (4) или (5) были решениями системы уравнений (1), необходима равномерная сходимость этих рядов. Используя очевидные неравенства

$$\left|\int_{-\infty}^{t} f(t')dt'\right| \leq \int_{-\infty}^{t} |f(t')|dt' < \int_{-\infty}^{\infty} |f(t')|dt' = S_0 \;, \tag{6}$$

легко построить мажорантные ряды

$$\begin{gathered} b_1 = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{S_0^{2n}}{2n!} = \mathrm{ch} S_0 , \\ b_2 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{S_0^{2n-1}}{(2n-1)!} = \mathrm{sh} S_0 , \end{gathered} \tag{7}$$

которые сходятся при всех конечных значениях S_0 и ω.

Формулы (4) и (5) действительно являются решением системы (1), что проверяется непосредственной подстановкой (4) и (5) в уравнения (1). Для того, чтобы выписать решение уравнения Шредингера с необходимой степенью точности, достаточно ограничиться определенным числом членов ряда. Так, например, оставляя в a_2 только первые n членов, мы допускаем ошибку, величина которой может быть оценена следующим образом:

$$\begin{gathered} |r| = \left| \sum_{n+1}^{\infty} (-1)^n \int_{-\infty}^{t} \dot{S} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} \dot{S}^* dt_2 \cdots \int_{-\infty}^{t_{2k-2}} \dot{S} dt_{2k-1} \right| \leq \sum_{n+1}^{\infty} \left| \frac{S_0^{2k-1}}{(2k-1)!} \right| = \\ = \mathrm{sh} S_0 - S_0 - \frac{S_0^3}{3!} - \ldots - \frac{S_0^{2n-1}}{(2n-1)!} . \end{gathered} \tag{8}$$

Чем больше $|S|$, тем больше членов ряда необходимо учитывать для достижения хорошей точности результатов.

3. Вероятность поглощения

Ограничиваясь первым приближением в разложении (4) (малые интенсивности), для вероятности перехода атома получаем

$$|a_2(\infty)|^2 = \left| \int_{-\infty}^{\infty} V e^{i\omega_{21}t} dt \right|^2 = |V(\omega_{21})|^2 , \tag{9}$$

где $V(\omega_{21})$ – спектральная компонента поля на резонансной частоте. Формула (9) соответствует хорошо известному результату [12] для вероятности поглощения.

Учет следующего члена в разложении дает

$$|a_2(\infty)|^2 = \left| S(\infty) - \int_{-\infty}^{\infty} \dot{S} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} \dot{S}^* S dt_2 \right|^2 . \tag{10}$$

Выражение (10) может быть представлено в физически более наглядном виде:

$$|a_2(+\infty)|^2 = \left| V(\omega_{21}) - \frac{1}{4\pi^2} \int\limits_{-\infty}^{+\infty}\int \frac{V(\omega_1)V(\omega_2)V^*(\omega_1+\omega_2-\omega_{21})d\omega_1 d\omega_2}{(\omega_{21}-\omega_1+i\varepsilon)(\omega_{21}-\omega_2-i\varepsilon)} \right|^2. \quad (11)$$

Малые мнимые части в знаменателе второго члена введены во избежание расходимости в точном резонансе [13].

Второй член в выражении (11) описывает трехфотонный параметрический процесс, в котором поглощаются фотоны ω_1 и ω_2, излучается частота $(\omega_2 + \omega_1 - \omega_{21})$ и атом переходит с нижнего на верхний уровень. Легко показать, что последуюшие члены ряда описывают подобные же многофотонные процессы. Следовательно, даже если в спектре импульса нет резонансной компоненты, вероятность перехода может быть отлична от нуля в следующих порядках теории возмущений. Например, во втором приближении необходимым условием для этого является наличие ненулевой спектральной компоненты на трехфотонных частотах, т.е. $V(\omega_{21}-\omega_1-\omega_2)$, где ω_1 и ω_2 принадлежат спектру падающего импульса.

4. Резонансное приближение

Вплоть до длительностей импульсов $T \sim 10$ фс напряженность $\mathbf{E}$ электрического поля излучения можно представить в виде

$$\mathbf{E} = \mathcal{E}(t,x)e^{-i\omega_0 t} + \text{к.с.}, \quad (12)$$

где ω_0 можно интерпретировать как несущую частоту импульса. Тогда, переходя к резонансному приближению, величину S необходимо заменить на $\widetilde{S} = \int\limits_{-\infty}^{t} \widetilde{V}(t')e^{i\Delta t'}dt'$, где Δ – расстройка резонанса ($\Delta = \omega_{21} - \omega_0$), а $\widetilde{V}$ – частота Раби ($\widetilde{V} = -\frac{\mathcal{E}\mathbf{d}_{12}}{\hbar}$).

В резонансном приближении и во втором приближении теории возмущений вместо формулы (11) имеем:

$$|a_2(+\infty)|^2 = \left| \widetilde{V}(\omega_{21}) - \frac{1}{4\pi^2} \int\limits_{-\infty}^{+\infty}\int \frac{\widetilde{V}^*(\omega_1+\omega_2-\Delta)\widetilde{V}(\omega_1)\widetilde{V}(\omega_2)d\omega_1 d\omega_2}{(\Delta-\omega_1+i\varepsilon)(\Delta-\omega_2-i\varepsilon)} \right|^2. \quad (13)$$

Для спектрально-ограниченных импульсов в точном резонансе величина $\widetilde{S}$ равна текущей площади импульса. В этом частном случае ряды легко суммируются, приводя к решениям, хорошо известным в литературе [1]:

$$a_1(t) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{\widetilde{S}^{2n}}{(2n)!} = \cos \int\limits_{-\infty}^{t} \widetilde{V}dt',$$
$$(14)$$
$$a_2(t) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{\widetilde{S}^{2n-1}}{(2n-1)!} = \sin \int\limits_{-\infty}^{t} \widetilde{V}dt'.$$

Таким образом, населенность возбужденного состояния после взаимодействия с импульсом определяется только резонансной спектральной компонентой падающего излучения:

$$|a_2(\infty)|^2 = \left|\sin \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{V} dt\right|^2 = \sin^2 \tilde{V}(\omega_{21})$$

(что переходит в (9) при малых интенсивностях).

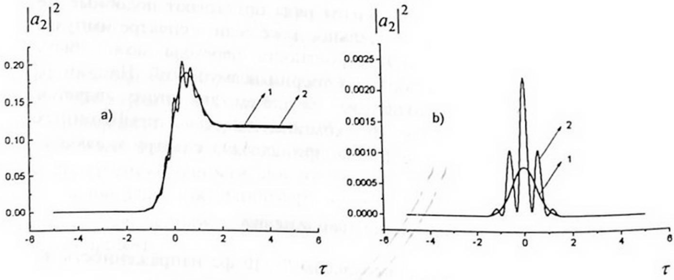


Рис.1. Временная эволюция ($\tau = t/T$, T – длительность импульса) населенности возбужденного уровня $|a_2|^2$ для гауссовского импульса $e^{-\tau^2}$, вычисленной в рамках резонансного приближения (кривая 1) и без него (кривая 2): а) $\omega_0 T = 8$, $\omega_{21}T = 10$, $\Delta T = 2$; b) $\omega_0 T = 5$, $\omega_{21}T = 25$, $\Delta T = 20$; $V_0 T = 0.3$.

На рис.1 приведены вероятности перехода атома в зависимости от времени для гауссовского импульса в резонансном приближении и без него: кривая 1 соответствует резонансному приближению ($\Delta \cdot T = 2$), а кривая 2 – без него ($\omega_{21}T = 10$; $\omega_0 T = 8$). Видно, что населенность верхнего уровня носит осциллирующий характер в течение длительности импульса. Однако стационарные значения населенностей отличаются незначительно.

Таким образом, мы описали довольно простой и удобный метод для вычисления с необходимой точностью вероятности возбуждения двухуровневого атома в лазерном поле. Мы вычислили эту величину без резонансного приближения, которое неприменимо для очень коротких (фс) импульсов, и показали, что вероятность возбуждения осциллирует до установления стационарного режима.

Авторы выражают благодарность М.Л.Тер-Микаеляну за многочисленные обсуждения и полезные замечания.

Работа выполнена в рамках научной темы 96-772, финансируемой из государственных централизованных источников Республики Армения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л.Аллен, Д.Эберли. Оптический резонанс и двухуровневые атомы. М., Мир,

2. B.W.Shore. The theory of coherent atomic excitation. New York, Wiley, 1990.
3. М.Л.Тер-Микаелян. УФН, **167**, 12 (1997).
4. N.Rosen, C.Zener. Phys. Rev., **40**, 50 (1932).
5. А.О.Меликян. Доклады АН Арм. ССР, **51**, 214 (1970).
6. A.Bambini, P.R.Berman. Phys. Rev. A, **23**, 2496 (1981).
7. N.V.Vitanov, S.Stenholm. Phys. Rev. A, **55**, 2982 (1997).
8. A.M.Ishkhanyan. J. Phys. A: Math. and Gen. Phys., **30**, 1203 (1997).
9. L.W.Casperson. Phys. Rev. A, **57**, 609 (1998).
10. С.А.Козлов, С.В.Сазонов. ЖЭТФ, **111**, 404 (1997).
11. M.L.Ter-Mikaelyan, G.G.Grigoryan. Laser Physics, **5**, 1171 (1995).
12. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Квантовая механика. М., Наука, 1980.
13. Н.Н.Боголюбов, Д.В.Ширков. Введение в квантовую теорию поля. М., Наука, 1976.

ԵՐԿՄԱԿԱՐԴԱԿ ԱՏՈՄԻ ՓՈԽԱԶԴԵՑՈՒԹՅՈՒՆԸ ՈՉ ՄՈՆՈՔՐՈՄԱՏԻԿ ԴԱՇՏԻ ՀԵՏ ԱՌԱՆՑ ՌԵԶՈՆԱՆՍԱՅԻՆ ՄՈՏԱՎՈՐՈՒԹՅԱՆ

Գ.Հ. ԳՐԻԳՈՐՅԱՆ, Ե.Թ. ՓԱՇԱՅԱՆ, Վ.Օ. ՉԱԼՏԻԿՅԱՆ

Դիտարկված է ոչ մոնոքրոմատիկ իմպուլսի դաշտում երկմակարդակ ատոմի խնդիրը առանց ռեզոնանսային մոտավորության: Օգտագործելով խոտորումների ոչ ստացիոնար տեսությունը, ստացված են վերլուծական արտահայտություններ ատոմի անցման հավանականության համար: Ցույց է տրված, թե ինչպես կարելի է պահանջվող ճշգրտությամբ հաշվարկել ատոմի գրգռման հավանականությունը: Ցույց է տրված, որ ատոմի վերին մակարդակի բնակեցումը դրսևորում է օսցիլյացիոն բնույթ, որը բացակայում է ռեզոնանսային մոտավորության դեպքում:

INTERACTION OF TWO-LEVEL ATOM WITH NONMONOCHROMATIC LASER FIELD WITHOUT RESONANT APPROXIMATION

G.G. GRIGORYAN, Y.T. PASHAYAN, V.O. CHALTYKYAN

The problem of a two-level atom interacting with a nonmonochromatic radiation pulse is studied without the resonant approximation. Using the time-dependent perturbation theory, the analytical expressions for transition probability of the atom are obtained. It is shown how, depending on the value of the field strength, the atom's excitation probability can be obtained with the needed accuracy. It is shown that the upper level population of the atom exhibits additional oscillations which are absent in the resonant approximation.

Известия НАН Армении, Физика, т.34, №5, с.272-281 (1999)

УДК 548.732

ПРИБЛИЖЕНИЕ ПРЯМОЛИНЕЙНЫХ ТРАЕКТОРИЙ В ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ ОПТИКЕ ДИНАМИЧЕСКОЙ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ

Л.А. АРУТЮНЯН, К.Г. ТРУНИ

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 6 мая 1998 г.)

Рассматривается геометрическая оптика динамической дифракции рентгеновских лучей в слабодеформированном кристалле в приближении прямолинейных траекторий. Выведены условия применимости этого приближения. Показано, что в этом случае как траектории, так и интенсивности рентгеновских пучков те же, что и в случае идеального кристалла. Деформация кристалла приводит к появлению фазовой добавки в пучках, пропорциональной интегралу по траектории луча от некой функции, задаваемой полем деформации кристалла. Наличие такой фазы экспериментально может проявляться в интерференционных явлениях.

1. Введение

Динамическая дифракция рентгеновских лучей в деформированном кристалле описывается системой дифференциальных уравнений в частных производных первого порядка – уравнениями Такаги [1]. Однако уравнения Такаги удается решить аналитически лишь в редких случаях. Развито также приближение геометрической оптики [2-3], согласно которому рентгеновское излучение в кристалле распространяется по криволинейным траекториям. Искривление траекторий лучей обусловлено градиентом относительной деформации решетки кристалла. Критерием примененимости данной теории является малость изменения относительной деформации в пределах экстинкционной длины, что естественно, т.к. последняя является характерной длиной формирования динамического волнового поля в кристалле. Но даже в приближении геометрической оптики аналитическое вычисление дифрагированного в кристалле рентгеновского излучения удается провести лишь для отдельных видов полей деформаций кристаллов.

В настоящей работе рассматривается случай, когда искривлением лучей можно пренебречь, считая их такими, какими они являются в случае идеального кристалла. Не зависящими от поля деформации оказываются и квазиамплитуды дифрагированных пучков. Дополнительное фазовое слагаемое, обусловленное полем деформации, при таком подходе представляется интегралом по траектории луча от функции, описывающей локальное смещение от условия Брэгга. Следует отметить, что

подобное приближение имеет широкое применение в оптике по иссл
дованию фазовых объектов неоднородных веществ, в которых нараш
вание фазы волны определяется интегралом по траектории луча
показателя преломления, зависящего от координат. Хотя наложенные
нашем случае ограничения на поле деформации кристалла намно
жестче, чем при обычной геометрической оптике (в частност
налагаются ограничения не только на быстроту изменения, но и на са
величину поля деформации, а также на толщину кристалла), они все
допускают деформации, приводящие к изменению фазы пучков поряд
π. Из сказанного следует, что предложенное приближение можно при
менять в рентгеновской интерферометрии, для исследования очен
слабых деформаций. Следует особо отметить компьютерную томо
графию, для математического аппарата которой крайне важна незави
симость траектории регистрируемого излучения от неоднородносте
тестируемого образца.

Отметим также, что в работе [3] уже приведены аналогичны
расчеты для падающей на кристалл плоской волны, при ориентации по
точным углом Брэгга. Мы же рассматриваем как случай падающе
плоской волны для произвольного отклонения от угла Брэгга, так
случай падающей сферической волны.

2. Вывод основных уравнений

В двухволновом приближении дифрагированное рентгеновское волновое поле в упруго деформированном кристалле может быть представлено в виде суммы проходящей и отраженной квазиплоских волн:

$$D(\mathbf{r}) = D_0(\mathbf{r})\exp(i\mathbf{k}_0\mathbf{r}) + D_h(\mathbf{r})\exp(i\mathbf{k}_h\mathbf{r} - \mathbf{h}\mathbf{U}(\mathbf{r})),$$

где $\mathbf{k}_h = \mathbf{k}_0 + \mathbf{h}$, $\mathbf{U}(\mathbf{r})$ – поле смещений деформированного кристалла, а $\mathbf{h}$ – вектор обратной решетки данного отражения. Квазиамплитуды D_0 и D_h удовлетворяют уравнениям Такаги [1], которые, при выборе вектора $\mathbf{k}_0$ согласно условию $k_0 = k_h = k \equiv Kn$, запишутся в виде

$$\begin{cases} \dfrac{\partial D_0}{\partial z} + \dfrac{\partial D_0}{\partial x} = i\gamma_{\bar{h}} D_h, \\ \dfrac{\partial D_h}{\partial z} - \dfrac{\partial D_h}{\partial x} = i\gamma_h D_0 + i\alpha D_h, \end{cases} \tag{1}$$

где введена безразмерная координатная система (x, y) в плоскости падения:

$$x = -\frac{\pi \operatorname{ctg}\theta_B}{\Lambda}\frac{\mathbf{h}\mathbf{r}}{h}, \qquad z = \frac{\pi}{\Lambda}\frac{(\mathbf{k}_0 + \mathbf{k}_h)\mathbf{r}}{|\mathbf{k}_0 + \mathbf{k}_h|}, \tag{2}$$

$\mathbf{r}$ – радиус-вектор рассматриваемой точки, $\alpha(x,z) = (\partial/\partial z - \partial/\partial x)(\mathbf{h}\mathbf{U})$ – функция от координат, описывающая локальное отклонение от условия Брэгга из-за деформации кристалла. Постоянные γ_h и $\gamma_{\bar{h}}$ имеют следующий вид: $\gamma_h = \chi_h \big/ \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}}$, $\gamma_{\bar{h}} = \chi_{\bar{h}} \big/ \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}}$. Остальные параметры, входящие неявно в уравнения Такаги, имеют следующие значения: $\Lambda = 2\pi\cos\theta_B / KC\sqrt{\chi_h\chi_{\bar h}}$ – экстинкционная длина, K – волновое число в вакууме, n – средний показатель преломления кристалла, χ_h и $\chi_{\bar h}$ – **h** и -**h** коэффициенты Фурье-разложения поляризуемости кристалла (мы пренебрегаем поглощением, так что произведение $\chi_h\chi_{\bar h}$, входящее в определение Λ, действительная и положительная величина), C – поляризационный фактор, равный единице для σ-поляризации и $\cos 2\theta_B$ для π-поляризации, θ_B – угол Брэгга.

В случае идеального кристалла $(\alpha \equiv 0)$ решением (1) является

$$D_0(x,z) = E_0 \exp(i(Px - Hz)), \quad D_h(x,z) = E_h \exp(i(Px - Hz)),$$

для произвольного значения параметра P. Здесь амплитуды E_0 и E_h связаны соотношением $E_h/E_0 = (P-H)/\gamma_{\bar h}$, а $H = \pm\sqrt{1+P^2}$ (два знака в выражении для H соответствуют двум ветвям дисперсионной поверхности).

Исходя из вышесказанного, в случае слабодеформированного кристалла $(\alpha << 0)$ решение уравнений Такаги будем искать в виде квазиплоских волн:

$$\hat{D}(x,z) = \hat{E}(x,z)\exp\big(i(Px - Hz)\big), \tag{3}$$

для произвольного значения параметра P и двух ветвей дисперсионной поверхности. Здесь, для компактности, мы перешли от *0* и *h* компонент кристаллического поля к двумерному вектору, так что $\hat{D} = (D_0, D_h)^T$ и $\hat{E} = (E_0, E_h)^T$ (верхний индекс T означает транспонирование вектора). Подставляя (3) в (1), получаем векторное уравнение $(T_S + T)\hat{E} = 0$, где

$$T_S = \begin{pmatrix} H-P & \gamma_{\bar h} \\ \gamma_h & H+P \end{pmatrix}, \qquad T = \begin{pmatrix} i\left(\dfrac{\partial}{\partial z} + \dfrac{\partial}{\partial x}\right) & 0 \\ 0 & i\left(\dfrac{\partial}{\partial z} - \dfrac{\partial}{\partial x}\right) + \alpha \end{pmatrix}.$$

Решение последнего уравнения при малых α можно искать методом последовательных приближений (см. [3]), согласно которому

$$\hat{E} = \sum_{n=0}^{\infty} \hat{E}^{(n)}, \tag{4}$$

где слагаемые $\hat{E}^{(n)}$ определяются бесконечной системой зацепленных уравнений

$$T_S \hat{E}^{(0)} = 0, \tag{5}$$

$$T_S \hat{E}^{(n)} + T_S \hat{E}^{(n-1)} = 0 \quad (n \geq 1). \tag{6}$$

Так как $\det(T_S) = 0$, матрица T_S имеет левый $\hat{l} = (\gamma_{h}, P-H)$ и правый $\hat{r} = (\gamma_{\bar{h}}, P-H)^T$ нуль-векторы. Из (5) следует, что $\hat{E}^{(0)}$ можно представить в виде $\hat{E}^{(0)}(x,z) = \sigma_0(x,z)\hat{r}$. Скалярная функция $\sigma_0(x,z)$ определяется из уравнения (6) при $n = 1$, которое после умножения слева на $\hat{l}$ приводится к

$$H\frac{\partial\sigma_0}{\partial z} + P\frac{\partial\sigma_0}{\partial x} + i(P-H)\frac{\alpha}{2}\sigma_0 = 0. \tag{7}$$

Полученное уравнение соответствует уравнению переноса (см.[3], (6.4)) в обычной геометрической оптике. Упомянутое является уравнением в частных производных первого порядка, с коэффициентами при производных, зависящих от поля деформации кристалла и, следовательно, от координат. В нашем случае эти коэффициенты постоянные, вследствие чего траектории лучей прямые и не зависят от поля деформации. Это связано с нашим выбором эйконала, а именно, *Px-Hz* (см. фазовый множитель в (3)), не зависящего от деформации кристалла.

Решение уравнения (7) в случае симметричной геометрии Лауэ, когда входная поверхность совпадает с плоскостью $z = 0$, удобно представить в виде

$$\sigma_0(x,z) = \tilde{\sigma}_0(x - z\,\mathrm{tg}\theta)\exp\left(\frac{i}{2}(1-\mathrm{tg}\theta)\int_0^z \alpha(\tilde{x}(t),t)\,dt\right), \tag{8}$$

где

$$\tilde{x}(t) = x - (z-t)\mathrm{tg}\theta, \qquad \theta = \mathrm{arctg}\left(\frac{P}{H}\right) \quad \left(-\frac{\pi}{2} < \theta < \frac{\pi}{2}\right).$$

Для члена первого порядка малости в разложении (4) из (6) при $n = 1$ и $n = 2$ имеем $\hat{E}^{(1)} = \sigma_1\hat{r} + \hat{\beta}$, где

$$\sigma_1(x,z) = \exp\left(\frac{i}{2}(1-\mathrm{tg}\theta)\int_0^z \alpha(\tilde{x}(t),t)\,dt\right) \times \tag{9}$$

$$\times\left[\tilde{\sigma}_1(x - z\,\mathrm{tg}\theta) + \frac{i}{\cos\theta}\int_0^z B(\tilde{x}(z'),z')\exp\left(-\frac{i}{2}(1-\mathrm{tg}\theta)\int_0^{z'} \alpha(\tilde{x}(t),t)\,dt\right)dz'\right],$$

$$\hat{\beta} = \left(\frac{i}{P-H}\left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x}\right)E_0^{(0)}, 0\right)^T, \tag{10}$$

$$B(x,z) = \frac{\cos\theta}{2H(P-H)^2}\left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \sigma_0(x,z).$$

Функции одного аргумента $\widetilde{\sigma}_0$ и $\widetilde{\sigma}_1$ определяются из граничных условий на входной поверхности кристалла.

3. Граничные условия

А. Случай падающей плоской волны. Пусть на кристалл падает плоская волна с волновым вектором $\mathbf{K}^{(in)}$ и амплитудой $E^{(in)}$. На входной поверхности кристалла ее можно представить в виде

$$D^{(in)}(x,z=0)=E^{(in)}e^{iPx}e^{i\mathbf{K}_0\mathbf{r}_e},$$

где

$$P=\frac{K_x^{(in)}-k_{0x}}{\pi}\Lambda\mathrm{tg}\theta_{\mathrm{B}}\,, \tag{11}$$

$\mathbf{r}_e$ – радиус-вектор рассматриваемой точки на входной поверхности кристалла, а $\mathbf{K}_0$, как и вектор $\mathbf{K}^{(in)}$, лежит в плоскости падения (плоскость, образованная векторами $\mathbf{k}_0$ и $\mathbf{k}_h$) и определяется из условий

$$|\mathbf{K}_0|=K,\quad K_{0x}=k_{0x}. \tag{12}$$

Волновое поле внутри кристалла будем искать в виде

$$D^{(cr)}=D_0^{(cr)}e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r}}+D_h^{(cr)}e^{i(\mathbf{k}_h\mathbf{r}-\mathbf{h}\mathbf{U})},\quad \hat{D}^{(cr)}\equiv\left(D_0^{(cr)},D_h^{(cr)}\right)^{\mathrm{T}}=\sum_{j=1}^{2}\hat{E}^{(j)}e^{i(Px-Hz)},$$

где суммирование по индексу j соответствует двум ветвям дисперсионной поверхности, а параметр P определяется выражением (11). Граничные условия на входной поверхности кристалла с учетом (12) запишутся в виде $\sum_{j=1}^{2}\hat{E}^{(j)}(x,z=0)=\left(E^{(in)},0\right)^{\mathrm{T}}$. Последнее, если ограничиться членами первого порядка малости в разложении (4), будет удовлетворено, если

$$\sum_{j=1}^{2}\widetilde{\sigma}_0^{(j)}(x)\hat{r}^{(j)}=\left(E^{(in)},0\right)^{\mathrm{T}},\qquad \sum_{j=1}^{2}\left(\widetilde{\sigma}_1^{(j)}(x)\hat{r}^{(j)}+\hat{\beta}^{(j)}(x,z=0)\right)=(0,0)^{\mathrm{T}}.$$

Из последнего с учетом (8-10) получаем

$$\sigma_0(x,z)=\gamma_h\frac{P+H}{2H}E^{(in)}\exp\left(\frac{i}{2}(1-\mathrm{tg}\theta)\int_0^z\alpha(\widetilde{x}(t),t)dt\right),$$

$$\sigma_1(x,z)=-\frac{P}{2H^2}\alpha(x-z\mathrm{tg}\theta,0)\sigma_0(x,z)-\frac{P+H}{4H^2}\sigma_0(x,z)\int_0^z V(\widetilde{x}(z'),z')dz',$$

$$\hat{\beta}(x,z)=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\cdot\frac{\gamma_{\bar{h}}}{2H}\sigma_0(x,z)\left(\alpha(x,z)+(1-\mathrm{tg}\theta)\int_0^z\alpha_x(\widetilde{x}(t),t)dt\right),$$

где

$$V(\xi,\eta)=\alpha_z(\xi,\eta)+(2-\mathrm{tg}\theta)\alpha_x(\xi,\eta)+(1-\mathrm{tg}\theta)^2\int_0^\eta \alpha_{xx}\big(\xi-(\eta-t)\mathrm{tg}\theta,t\big)dt+$$

$$+\frac{i}{2}(1-\mathrm{tg}\theta)\left[\alpha\xi,\eta)+(1-\mathrm{tg}\theta)\int_0^\eta \alpha_x\big(\xi-(\eta-t)\mathrm{tg}\theta,t\big)dt\right]^2.$$

Нижний индекс x или z у функции α означает дифференцирование по первому или второму аргументу соответственно.

Как видно из приведенных формул, при выполнении условий

$$z\gg 1,\quad |\alpha|_{\max} z\sim 1,\quad \frac{|\mathrm{grad}\alpha|_{\max}}{|\alpha|_{\max}}z\sim 1,\quad \frac{|\alpha_{xx}|_{\max}}{|\alpha|_{\max}}z^2\sim 1 \qquad (13)$$

имеют место неравенства $|\sigma_1/\sigma_0|\ll 1$, $|\beta_0/\sigma_0|\ll 1$ и можно ограничиться членом нулевого порядка в примененном нами методе последовательных приближений. В этом случае для квазиамплитуд кристаллического волнового поля получаем $\hat{D}^{(cr)}\cong\sum_{j=1}^{2}\hat{D}^{(j)}$, где

$$\hat{D}^{(j)}(x,y)=\begin{pmatrix}\dfrac{P+H}{2H}\\ -\dfrac{\lambda_h}{2H}\end{pmatrix}\cdot E^{(in)}\exp\left\{i\left(Px-Hz+\frac{1}{2}(1-\mathrm{tg}\theta)\int_0^z\alpha(\tilde{x}(t),t)dt\right)\right\}. \qquad (14)$$

Выражение (14) отличается от точного решения уравнения Таками для идеального кристалла лишь добавочным фазовым членом, пропорциональным $\int_0^z\alpha(\tilde{x}(t),t)dt$, который является интегралом от α по прямому отрезку, параллельному вектору Пойнтинга, от входной поверхности кристалла до точки наблюдения. Естественно эту прямую интерпретировать как траекторию распространения волны. Отметим, что она не зависит от поля деформации кристалла.

Б. Случай падающей сферической волны. Пусть на входную поверхность кристалла падает монохроматическая сферическая волна, излучаемая от источника, удаленного на вектор $(-\mathbf{K}_0/K)R$ от начала координат:

$$D^{(in)}(\mathbf{r})\equiv D_0^{(in)}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{K}_0\mathbf{r}}=\big(R/l\big)e^{iKl}.$$

Здесь $\mathbf{r}$ – радиус-вектор точки наблюдения, а l – расстояние от точечного источника до точки наблюдения. Разлагая l в ряд по малому параметру x/R, для квазиамплитуды падающего излучения $D_0^{(in)}$ на входной поверхности кристалла z = 0 получаем $D_0^{(in)}(x,z=0)=$ $=\exp\big(iKR+i\,x^2/(2R_0)\big)$, где R_0 – так называемое приведенное вакуумное расстояние:

$$R_0 = \frac{\pi^2}{K\Lambda^2 \sin^2 \theta_B} R .$$

Представим падающее излучение на $z=0$ как суперпозицию плоских волн:

$$D^{(in)}(x, z=0) = \int_{-\infty}^{+\infty} E_0^{(in)}(P) e^{i(\mathbf{K}_0 \mathbf{r}_e + Px)} dP , \qquad (15)$$

где $E_0^{(in)}(P)$ – Фурье-образ квазиамплитуды падающего излучения:

$$E_0^{(in)}(P) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} D_0^{(in)}(x, z=0) e^{-iPx} dx = \sqrt{\frac{R_0}{2\pi}} \exp\left(i \left(KR - \frac{R_0}{2} P^2 + \frac{\pi}{4} \right) \right). \qquad (16)$$

Представив дифрагированное волновое поле в кристалле как суперпозицию откликов отдельных плосковолновых компонент падающего излучения, согласно (14-16), для квазиамплитуд кристаллического волнового поля получаем

$$\hat{D}^{(j)}(x, z) = A \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{f}(P, x, z) \exp(izF(P, x, z)) dP , \qquad (17)$$

где

$$\hat{f}(P, x, z) = \begin{pmatrix} \dfrac{P+H}{2H} \\ -\dfrac{\gamma_h}{2H} \end{pmatrix} \exp\left(\frac{i}{2}(1 - \mathrm{tg}\theta) \int_0^z \alpha(\tilde{x}(t), t) dt \right),$$

$$F(P, x, z) = \mp\sqrt{1+P^2} - \frac{R_0}{2z} P^2 + \frac{x}{z} P, \quad A = \sqrt{\frac{R_0}{2\pi}} \exp\left(iKR + i\frac{\pi}{4} \right)$$

(верхний знак соответствует ветви дисперсионной поверхности с $j = 1$, нижний – $j = 2$).

С учетом условий (13), интеграл (17) в точках, далеких от каустик и фокусов, можно вычислить асимптотическим методом стационарной фазы [4]. Согласно последнему

$$\hat{D}^{(j)}(x, z) = A \sqrt{\frac{2\pi}{z|F_0''|}} \hat{f}(P_0, x, z) \exp\left(izF(P_0, x, z) + i\nu\frac{\pi}{4} \right),$$

где

$$F_0'' = \left. \frac{\partial^2 F}{\partial P^2} \right|_{P=P_0}, \qquad \nu = \begin{cases} 1, & F_0'' > 0, \\ -1, & F_0'' < 0, \end{cases}$$

точка стационарной фазы P_0 определяется из условия

$$\left. \frac{\partial F}{\partial P} \right|_{P=P_0} \equiv \mp \frac{P_0}{\sqrt{1+P_0^2}} - \frac{R_0}{z} P_0 + \frac{x}{z} = 0 . \qquad (18)$$

Аналогичным образом можно рассматривать случаи, соответствующие другим видам падающих на кристалл неоднородных волновых пакетов.

Семейства траекторий кристаллического волнового поля определяются из условия $P_0 = \text{const}$ и, согласно (18), имеют вид прямых

$$x = \pm \frac{P_0}{\sqrt{1 + P_0^2}} z + R_0 P_0 \qquad (-\infty < P_0 < +\infty),$$

не зависящих от поля деформации кристалла. Наличие деформации приводит лишь к появлению добавочной фазы в квазиамплитудах кристаллического поля, пропорциональной интегралу от $\alpha(x,z)$ по траектории луча – $\int\limits_0^z \alpha(\tilde{x}(t),t)dt$.

Заметим также, что не зависят от деформации и распределения амплитуд дифрагированных рентгеновских полей, соответствующие отдельным ветвям дисперсионной поверхности. Однако общее распределение интенсивностей дифрагированных волновых пакетов все же зависит от поля деформации кристалла, т.к. оно представляется интерференцией полей, соответствующих обоим ветвям дисперсионной поверхности.

4. Обсуждение результатов

Таким образом, мы вычислили дифрагированное волновое поле внутри кристалла при падающей плоской и сферической волне. В обоих случаях выражения для квазиамплитуд кристаллических полей $\hat{D}^{(j)}$ отличаются от аналогичных выражений для идеального кристалла только добавочным фазовым членом

$$\Phi = \frac{1}{2}(1 - \text{tg}\theta)\int\limits_0^z \alpha(\tilde{x}(t),t)dt.$$

Входящий неявно в это выражение параметр P в случае падающей плоской волны определяется выражением (11), а в случае сферической – условием стационарной фазы (18). В обоих случаях добавочная фаза пропорциональна интегралу от функции, описывающей поле деформации кристалла $\alpha(x,z)$ вдоль траектории луча внутри кристалла. Эта траектория прямая и не зависит от деформации кристалла.

Рассмотрим подробно область применения вышеизложенной теории – ограничения (13). С учетом (2), условие (13.1) (под обозначением (13.i) имеется ввиду i-ое условие в системе (13)) означает, что толщина кристалла должна быть намного больше экстинкционной длины. Такое требование естественно, т.к. роль длины волны при динамической дифракции рентгеновских лучей в кристаллах играет экстинкционная длина. В условиях (13.2-4), налагающих ограничения на функцию, описывающую поле деформации кристалла, как множитель входит толщина кристалла z. Следовательно, для произвольной, заранее заданной функции $\alpha(x,z)$, неограниченное увеличение толщины кристалла приводит к нарушению условий (13). Согласно (13.1-2) $|\alpha|_{\max} \ll 1$. Такое ограничение, когда пренебрегается влиянием деформации кристалла на траектории лучей, естественно, если учитывать, что $\alpha(x,z)$ описывает локальное отклонение от условия Брэгга и, следовательно, изменение направления траектории лучей, обусловленное деформацией кристалла. Условия (13.3-4) требуют гладкости функции $\alpha(x,z)$ в смысле его первой и второй производных. Они, конечно же, включают в себя основное требование обычной геометрической оптики (оптики криволинейных траекторий), согласно которому характерная длина изменения поля деформации L должна быть намного больше экстинкционной длины. В нашем случае L должна быть порядка или больше толщины кристалла.

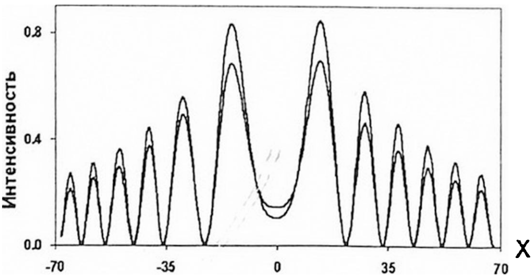


Рис.1. Пространственное распределение интенсивности в отраженном от кристалла рентгеновском пучке, рассчитанное с применением предложенного приближения (верхняя кривая) и непосредственно из уравнений Такаги путем численного интегрирования (нижняя кривая).

Хотя условия (13) намного жестче, чем ограничения обычной геометрической оптики, они все же допускают деформации, при которых фазовая добавка Ф, обусловленная наличием деформации, порядка π. Из сказанного следует, что вышеизложенная теория может найти применение для исследования слабодеформированных кристаллов методами, при которых регистрируемое распределение интенсивности обусловлено интерференцией. К таким методам относится рентгеновская интерферометрия, а также исследование дифракции на не сильнопоглощающем кристалле, где в образовании дифракционного поля принимают участие обе ветви дисперсионной поверхности.

В качестве примера рассмотрено образование так называемых аномальных Pendellösung полос [5] (случай падающей на кристалл сферической волны, когда $R_0 > z$) в отраженных от плоскопараллельной кристаллической пластины рентгеновских лучах, при наличии в кристалле краевой дислокации, перпендикулярной входной поверхности кристалла, и с вектором Бюргерса, параллельным оси x. На рис.1 приведено пространственное распределение аномальных Pendellösung полос, рассчитанное с применением вышеизложенной теории (верхняя кривая) и численным интегрированием уравнений Такаги (нижняя кривая). Большая интенсивность в первом случае обусловлена пренебрежением поглощения в наших расчетах, однако общий вид и расположение экстремумов интерференционных полос на обеих кривых совпадают. Расчеты проведены для излучения AgK_{α_1}, отражения Si[220] и величины вектора Бюргерса $b = a/\sqrt{2}$ (a – постоянная кристаллической решетки). Расстояние линии дислокации от плоскости падения было 16,7 мкм. Значения других параметров следующие: $R_0 = 40$, $z = 19$ (последнее соответствует толщине кристалла 283,2 мкм), проекция линии дислокации на плоскость рассеяния пересекает ось x при $x = -38$.

ЛИТЕРАТУРА

1. **S.Takagi**. J. Phys. Soc. Japan, **26**, 1239 (1969).
2. **F.N.Chukhovskii** and **A.A.Shtolberg**. Phys. stat. sol., **41**, 815 (1970).
3. **В.Л.Инденбом, Ф.Н.Чуховский**. УФН, **107**, 229 (1972).
4. **М.В.Федорюк.** Асимптотика: Интегралы и ряды. М., Наука, 1987.
5. **V.V.Aristov, V.I.Polovinkina, A.M.Afanas'ev,** and **V.G.Kohn**. Acta Cryst., **A36**, 1002 (1980).

ՈՒՂՂԱԳԻԾ ՀԵՏԱԳԾԵՐԻ ՄՈՏԱՎՈՐՈՒԹՅՈՒՆԸ ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՃԱՌԱԳԱՅԹՆԵՐԻ ԴԻՆԱՄԻԿ ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՅԻ ԵՐԿՐԱՉԱՓԱԿԱՆ ՕՊՏԻԿԱՅՈՒՄ

Լ. Ա. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Կ. Գ. ԹՐՈՒՆԻ

Դիտարկվում է ռենտգենյան ճառագայթների դինամիկ դիֆրակցիայի երկրաչափական օպտիկան թույլ դեֆորմացված բյուրեղներում, ուղղագիծ հետագծերի մոտավորությամբ: Դուրս են բերված այդ մոտավորության կիրառման պայմանները: Ցույց է տրված, որ այդ դեպքում ռենտգենյան փնջերի թե ինտենսիվությունները, թե հետագծերը նույնն են, ինչ կատարյալ բյուրեղի դեպքում: Բյուրեղում դեֆորմացիայի առկայությունը բերում է փնջերում լրացուցիչ ֆազային հավելման, որը համեմատական է բյուրեղի դեֆորմացիայի դաշտով որոշվող ֆունկցիայից ինտեգրալի, ըստ ճառագայթի հետագծի: Փորձարարական տեսանկյունից այսպիսի ֆազի առկայությունը կարող է դրսեւորվել ինտերֆերենցիոն երևույթներում:

RECTILINEAR PATH APPROACH IN GEOMETRIC OPTICS OF DYNAMIC DIFFRACTION OF X-RAYS

L. A. HAROUTUNYAN, K. G. TROUNI

The geometric optics of dynamic diffraction of X-rays in weakly distorted crystals in the approach of rectilinear trajectories is considered. The condition of applicability of this approach is derived. It is shown that in this approach the paths of rays as well as their intensities are same as those for the ideal crystal. The distortion of crystal gives rise to an additional phase of the beam proportional to the integral of some function given by the field of deformation of crystal along the ray path. From the experimental point of view the presence of such phase can be revealed in interferometric phenomena.

Известия НАН Армении, Физика, т.34, №5, с.282-290 (1999)

УДК 537.311

НОВЫЙ ПОДХОД К ПРОБЛЕМЕ ПОВЫШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Ю.А. АБРАМЯН, В.И. СЕРАГО

Институт радиофизики и электроники НАН Армении

В.М. АРУТЮНЯН

Ереванский государственный университет

И.Д. АНИСИМОВА, В.И. СТАФЕЕВ

НПО "Орион", Москва, Россия

Г.Г. КАРАМЯН, Г.А. МАРТОЯН, А.А. МУРАДЯН

Институт Солнца, Ереван, Армения

(Поступила в редакцию 8 декабря 1998 г.)

В работе описан эффект повышения КПД солнечных элементов (СЭ) (в частности, наиболее распространенных кремниевых СЭ), основанный на покрытии СЭ изотропным жидким диэлектриком. Присутствие тонкого слоя последнего приводит к росту эффективности СЭ на 40-60% от исходного значения. Проанализированы вольт-амперные характеристики, коэффициент заполнения и другие характеристики СЭ. Обсуждены механизмы увеличения эффективности СЭ.

Введение

При разработке новых солнечных элементов (СЭ) и солнечных батарей с высокими значениями КПД и низкой стоимостью предложены, в частности, новые конструкции СЭ с применением текстурирования и просветления поверхности с помощью различных твердотельных тонкопленочных покрытий. Это обеспечило довольно эффективное преобразование солнечной энергии в электрическую. Сегодня в условиях обычного, неконцентрированного солнечного излучения реализованы значения эффективности 24% на гомогенных монокристаллических кремниевых СЭ на образцах с площадью 4 см^2 и 22,7% на кремниевых солнечных батареях с площадью 778 см^2 [1]. Основной задачей при создании таких покрытий является обеспечение химической защиты полупроводниковых СЭ от коррозии во внешней среде с одновременным уменьшением коэффициента отражения излучения от полупроводниковой структуры. Адсорбционные явления влаги и паров воды на кремнии детально изучены. Они влекут за собой окисление кремния, создание поверхностных состояний и, соответственно, повышают роль поверхностной рекомбинации, искривления зон, приповерхностных зарядов и т.п.

Наряду с пассивацией поверхности твердотельных СЭ методами, обсужденными выше, сравнительно недавно стали интенсивно разрабатываться жидкостные СЭ на основе полупроводникового фотоэлектрода – анода или (и) катода, прозрачного для солнечного излучения жидкого электролита с соответствующими окислительно-восстановительными парами и металлического электрода. В ряде случаев реализованы такие СЭ, где оба электрода изготовлены из фоточувствительных полупроводников. Реализованы КПД 15% для случая монокристаллического фотоэлектрода из n-GaAs, 12% для монокристаллического кремниевого фотоанода и 22,3% для гетероэлектрода Ti_2O_3 – Si [2-3]. В жидкостных СЭ происходят сложные физико-химические явления на границе раздела полупроводник-электролит, которая иногда упрощенно рассматривается как гетеропереход или диод Шоттки [2-4]. Возможны интенсивная инжекция носителей заряда из электролита в полупроводник и их туннелирование через искривленные зоны, уменьшение скорости поверхностной рекомбинации в приповерхностном слое полупроводника и т.п.

Естественным дальнейшим шагом в разработке твердотельных и жидкостных СЭ является предпринятая в настоящей работе попытка изучения свойств кремниевого СЭ с соответствующим твердотельным антиотражающим покрытием при помещении такого СЭ в индифферентный (нейтральный) электролит. Последний, по идее, должен обеспечить дальнейшее увеличение в СЭ концентрации носителей заряда и их времени жизни в первую очередь из-за дальнейшего уменьшения коэффициента отражения излучения от полупроводника. Как будет показано ниже, все это может быть обеспечено при выборе соответствующих диэлектрических жидкостей с высокими значениями коэффициента преломления, диэлектрической постоянной и удельного сопротивления.

Экспериментальные результаты

Для исследования влияния на КПД таких диэлектрических жидкостей, как глицерин, изопропиловый спирт, ацетон, бутанол, диоксан, толуол и деионизованная вода, использовались стандартные кремниевые СЭ советского производства с общепринятой конфигурацией контактной сетки. Размеры площадей СЭ были 2 см^2, 4 см^2 и 20 см^2. Исследуемые элементы располагались на дне сосуда-кюветы, как показано на рис.1. После установки элементов проводились измерения нагрузочных вольт-амперных характеристик, $I_{кз}$ и $U_{хх}$ ($I_{кз}$ – ток короткого замыкания, $U_{хх}$ –напряжение холостого хода) при различных плотностях солнечного излучения для диффузного дневного света и при прямой солнечной радиации с интенсивностью $W \sim$ 70-80 мВт/см^2. После проведения измерений указанных характеристик СЭ без жидкости, в кювету заливали исходную жидкость и вновь проводились измерения при тех же значениях интенсивности солнечной радиации. Предварительно СЭ протирались ватным тампоном, смоченным изопропиловым спиртом, обезжиривались в кипящем толуоле и затем в его парах, промывались в деионизованной холодной, а затем в горячей воде [5]. Далее СЭ просушивались в термостате при T = 150–200^{0}С в течение 1–2 часов. На рис.2 показана нагрузочная вольт-амперная характеристика (ВАХ) для одного из исследованных СЭ площадью около 20 см^2 в отсутствие жидкости (глицерина) на поверхности *n*-слоя (*n-p*-солнечный элемент) и в ее присутствии. Данные на рис.3 приведены при заливке двух включенных параллельно СЭ площадью около 20 см^2 глицерином при измерениях в помещении в яркий солнечный день в тех же условиях освещенности АМ2. Нами показано, что эффективность (КПД) кремниевых СЭ при прямой солнечной радиации в среднем может вырасти в 1,4–1,6 раза (прирост 40–60%). Так, например, для обычного серийного выпускаемого СЭ КПД возрастал от 8% до 13,6–14% при прямой солнечной радиации с интенсивностью W ~ 80 мВт/см^2. Для этого СЭ до заливки глицерином наблюдались $I_{кз}$ = 10 мА и $U_{хх}$ = 0,392 В, а после заливки – $I_{кз}$ = 21 мА и $U_{хх}$ = 0,5 В. Заметим, что с уменьшением интенсивности солнечного излучения наблюдались еще большие изменения $I_{кз}$ и $U_{хх}$. Коэффициент заполнения ВАХ при заливке жидкости практически мало изменялся, поэтому изменение КПД определяется в основном изменениями в величинах $I_{кз}$ и $U_{хх}$.

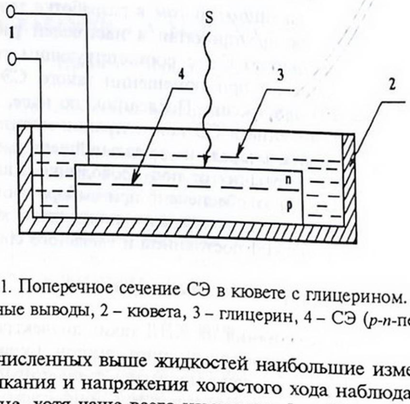


Рис.1. Поперечное сечение СЭ в кювете с глицерином.
1 – контактные выводы, 2 – кювета, 3 – глицерин, 4 – СЭ (*p-n*-переход).

Из перечисленных выше жидкостей наибольшие изменения тока короткого замыкания и напряжения холостого хода наблюдались в ацетоне и глицерине, хотя чаще всего изменения $I_{кз}$ и $U_{хх}$ определялись качеством предварительной обработки поверхности СЭ. Следует отметить, что, помимо исследования рассматриваемого эффекта на отдельных СЭ, были изготовлены два модуля из четырех СЭ с одинаковыми, заранее подобранными значениями $I_{кз}$ и $U_{хх}$. СЭ с площадью ~ 20 см^2 по две штуки соединялись параллельно и устанавливались на дне кюветы из оргстекла высотой до 5-6 мм. Одна из кювет после заполнения глицерином закрывалась. Оба модуля (с глицерином и без него) устанавливались на одной панели рядом. Посредством обычного переключателя с помощью миллиамперметра и вольтметра, установленных на панели, можно достаточно быстро проводить измерения $I_{кз}$ и $U_{хх}$ при различных наклонах модулей к направлению излучения Солнца. Подобные измерения были проведены в течение года. Нагрузочная ВАХ модуля из двух СЭ при прямой солнечной радиации ($W \sim 80$ мВт/см^2, Солнце в зените) показана на рис.3. Было также обнаружено, что, наряду с заливкой СЭ органической жидкостью определенной высоты, эффект возрастания КПД на меньшую величину имел место, если поверхность кристалла смачивалась тонким слоем глицерина и поверх него было установлено оптическое стекло марки К8 или Ф1 толщиной 0,5-2 см. Непосредственное смыкание оптического стекла с поверхностью СЭ приводило к уменьшению $I_{кз}$ и $U_{хх}$, однако наличие прослойки глицерина, смачивающего обе соприкасающиеся поверхности стекла и СЭ, приводит к росту $I_{кз}$ и $U_{хх}$ последнего примерно на 40%, т.е. чуть меньше, чем при непосредственной заливке.

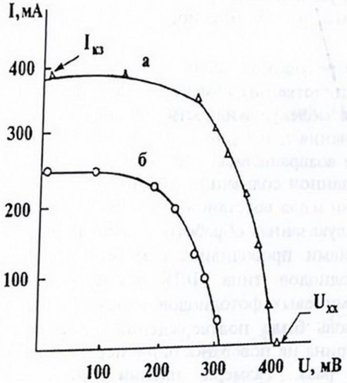


Рис.2. ВАХ СЭ для диффузного солнечного излучения: а) СЭ в глицерине, б) глицерин отсутствует. Площадь элемента – 20 см^2.

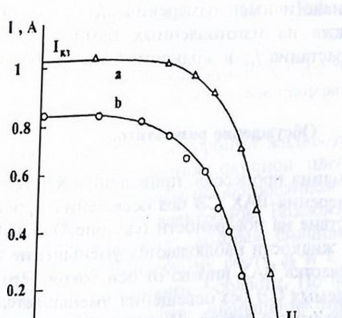


Рис.3. Нагрузочные ВАХ модуля из двух параллельно включенных СЭ площадью по 20 см^2 при прямой солнечной радиации: а) СЭ в глицерине, б) глицерин отсутствует.

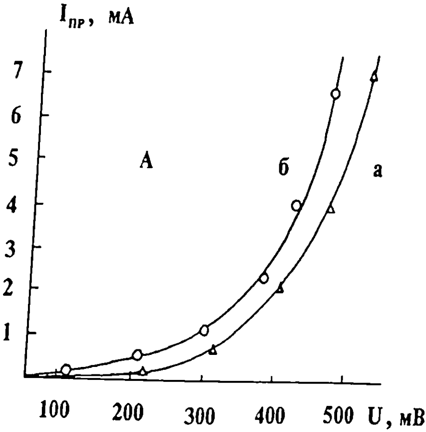
При смачивании поверхности СЭ жидкостью рост $I_{кз}$ осуществлялся очень быстро во времени. Соответствующий рост $I_{кз}$ и $U_{хх}$ имел место и при дальнейшем увеличении уровня жидкости над поверхностью кристалла до 5–6 мм. Дальнейшее повышение уровня жидкости приводило к некоторому уменьшению $I_{кз}$. Заметим, что высота уровня жидкости, при которой $I_{кз}$ достигал наибольшего значения, находилась в сильной зависимости от состояния поверхности СЭ. Указанный эффект роста $I_{кз}$ и некоторое его дальнейшее уменьшение зависели в какой-то степени и от размеров кюветы и СЭ (а также от состава и общего количества жидкости). Здесь следует отметить, что если под пустой кюветой расположить СЭ, т.е. исключить его прямой контакт с жидкостью, то наблюдается некоторое уменьшение $I_{кз}$ с заливкой, начиная примерно с высоты жидкости 4–5 мм, что, возможно, связано с ростом отражения излучения в системе.

Вышеуказанные результаты свидетельствуют о том, что за изменение КПД в целом ответственны изменение коэффициента отражения в системе и адсорбция молекул жидкости. Отметим, что после первой заливки жидкости значения $I_{кз}$ и $U_{хх}$ при последующих измерениях (после слива жидкости) не возвращались к исходным значениям, т.е. система инерционна. При данной солнечной радиации значения $I_{кз}$ и $U_{хх}$ оказывались завышенными и для восстановления их первоначальных значений проводилась вышеуказанная обработка поверхности.

Помимо СЭ нами проводились измерения фотопроводимости промышленных фотодиодов типа ФДК со снятой иммерсионной линзой, а также кремниевых фотодиодов с размерами 2×2 мм^2, изготовленных нами. Вновь было подтверждено, что нанесение чуть заметной пленки глицерина на поверхность *p-n*-перехода приводит к росту фототока в 1,5–1,8 раза. Размеры пленки при этом не играли существенной роли. Времена жизни носителей заряда $\tau_{эф}$, измеренные по общеизвестной методике из данных по релаксации напряжения в режиме вентильной фото-эдс, показали, что $\tau_{эф}$ в них растет примерно во столько же раз. Аналогичные измерения $I_{кз}$ в деионизованной воде проводились также на изготовленных нами СЭ из $CuInSe_2$. В последнем случае возрастание $I_{кз}$ в жидкости было слабее и составляло не более 15%.

Обсуждение результатов

С целью понимания процессов, приводящих к возрастанию КПД СЭ, проводились измерения ВАХ СЭ без освещения при наличии глицерина и в его отсутствие на поверхности (см. рис.4). Как видно из рисунка, в присутствии жидкости наблюдаются уменьшение обратного тока и сдвиг прямого участка ВАХ вправо от оси токов. Это указывает на то, что в рассматриваемых СЭ без освещения уменьшается скорость генерации в области объемного заряда. Известно [6], что ширина области объемного заряда d и контактная разность потенциалов *p-n*-перехода $\varphi_к$ определяются в основном концентрациями носителей заряда в *n*-области (n_n, p_n) и *p*-области (p_p, n_p).



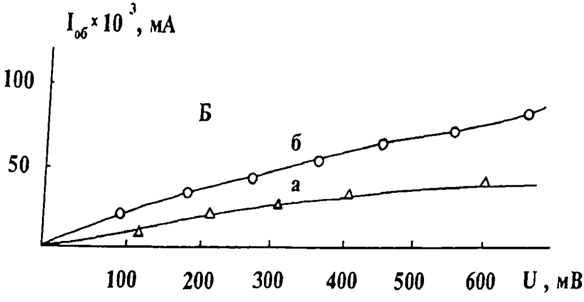


Рис.4. А и Б – прямые и обратные ВАХ СЭ в темноте:
а) образец в глицерине, б) в отсутствие глицерина.

Как уже указывалось, при адсорбции жидкости на поверхности кремния (или в самой поверхностной окисной пленке) формируется положительный заряд, сопровождаемый образованием в приповерхностной области избыточного заряда электронов. Возможно, что рост концентрации электронов в *n*-области, которая смачивается жидкостью, приводит к слабому, логарифмическому росту φ_k и к уменьшению области объемного заряда d_n со стороны *n*-области. По этой причине возможно наблюдаемое на эксперименте уменьшение тока при прямом и обратном смещениях. Обычно адсорбция "правильно" подобранной жидкости на поверхности кремния приводит к существенному уменьшению скорости поверхностной рекомбинации носителей заряда, что должно сопровождаться резким ростом их времени жизни у поверхности *n*-типа, а, следовательно, и диффузионных длин неосновных носителей заряда. Иногда реализовывались также случаи неизменности темновых токов СЭ в присутствии жидкости и без нее, однако и в данном случае соответствующее возрастание $I_{кз}$ и $U_{хх}$ также имело место, а КПД возрастал на ≥35-40%. Кроме того, рост КПД с заливкой наблюдался и в СЭ с *p-n*-переходом, когда контактирующая с жидкостью поверхность имела проводимость *p*-типа и где с увеличением адсорбции молекул жидкости p_p уменьшалась.

Расчет ВАХ и КПД СЭ с учетом скорости поверхностной рекомбинации приведен во многих работах. При ее подавлении КПД СЭ может значительно возрасти [7]. Конечно, величина тока короткого замыкания будет определяться не только скоростью поверхностной рекомбинации, но и расстоянием *p-n*-перехода от поверхности, диффузионной длиной неосновных носителей, а также спектральным составом падающего излучения. Полагаем, что все же главными причинами возрастания КПД СЭ, размещенного в жидкости, являются, в основном, рост $I_{кз}$ и соответствующее уменьшение скорости поверхностной рекомбинации (не изгиб зон или рост n_n), что следует также из величин $U_{хх}$, измеренных при слабых и сильных интенсивностях освещения. Как было отмечено ранее, увеличение $U_{хх}$ при слабых интенсивностях освещения при заливке существенно выше, чем при высоких интенсивностях. Сказанное следует непосредственно из обычного выражения для напряжения холостого хода. Отметим также, что зависимость $I_{кз}$ от уровня жидкости над поверхностью СЭ остается не до конца понятой. Скорее всего, с ростом уровня жидкости до определенной высоты растет просветляющее действие слоев – жидкость, адсорбированный слой, поверхность окисла на кремнии. С целью проверки этого предположения проводилось сравнение фототоков короткого замыкания СЭ, расположенного на одной и той же высоте (1,5–2 см) над поверхностью двух модулей, залитых глицерином и без него. При этом поверхность СЭ, фиксирующего $I_{кз}$, была строго параллельна солнечным элементам модулей в кювете. Подобные многократные измерения показали, что присутствие глицерина приводит к заметному увеличению $I_{кз}$, что может быть связано с уменьшением доли отраженной части излучения в присутствии жидкости.

Вместе с тем, рост $I_{кз}$ с увеличением толщины слоя жидкости над поверхностью СЭ до 5-6 мм и дальнейшее его уменьшение можно качественно объяснить на примере помещения СЭ в деионизованную воду, в которой вышеуказанный эффект выражается наиболее ярко. Известно [8], что вода сильно поглощает ИК-излучение с длиной волны $\lambda \sim 1$ мкм, поэтому воду часто используют как теплозащитный фильтр. Так, для слоя воды толщиной 1 мм активное поглощение имеет место начиная с $\lambda \geq 1,6$ мкм. Такое поглощение жидкостью ИК-излучения вблизи поверхности твердого тела может вызвать частичную десорбцию. При этом с ростом толщины слоя жидкости следует ожидать некоторого роста давления, большей смачиваемости поверхности (т. е. роста степени заполнения), а также меньшего воздействия поглощенного излучения на адсорбционно-десорбционное равновесие. В результате, с ростом толщины слоя жидкости адсорбция должна расти. Однако уже при толщинах слоя жидкости ~ 1 см, помимо поглощения излучения с $\lambda \geq 1,6$ мкм, имеет место появление полос поглощения с $\lambda < 1$ мкм и ослабление прохождения через жидкость активной части излучения, ответственной за генерацию электронно-дырочных пар в кремнии. Поэтому, возможно, должна существовать определенная толщина слоя жидкости (d <1см), при которой $I_{кз}$ максимален. Кроме того, наличие двойного электрического слоя (слой ориентированных дипольных молекул) на границе с поверхностью твердого тела должно приводить к изменению показателя преломления в приповерхностной области и возможному диффузионному рассеянию падающего излучения на случайных скоплениях или флуктуациях адсорбированных молекул [9], результатом чего может явиться уменьшение коэффициента отражения. Что касается опыта с тонкой прослойкой жидкости и оптически прозрачным стеклом, то подобные стекла также поглощают излучение с $\lambda \geq 1{,}8$ см (при толщинах ~ 1 см), но не непосредственно у границы поверхности жидкости с твердым телом. Что касается уменьшения роста $I_{кз}$ с ростом интенсивности солнечной радиации, то, на наш взгляд, освещение поверхности кристалла может сместить существующее равновесие между адсорбцией и десорбцией в ту или иную сторону и, очевидно, этот эффект зависит от интенсивности падающего излучения. Если адсорбированные на поверхности частицы создают положительный заряд, как это имеет место при адсорбции молекул воды, спирта, ацетона и т.д., то захват избыточных электронов на поверхности должен приводить к нейтрализации адсорбированных частиц. При этом в среднем увеличивается их отрыв от поверхности, что может способствовать некоторой десорбции. Помимо сказанного, очевидно, что процессы влияния адсорбции органических жидкостей либо деионизованной воды на $I_{кз}$ (а, следовательно, и на рост КПД СЭ) должны также в заметной степени зависеть как от состава, так и от толщины используемых антиотражающих покрытий СЭ. Это требует дополнительных исследований.

Таким образом, можно принять, что возрастание $I_{кз}$ (а, следовательно, и U_{xx}) при помещении СЭ в жидкость определяется несколькими причинами: увеличением высоты барьера n-p-перехода, уменьшением скорости поверхностной рекомбинации, сопровождаемым ростом коэффициента разделения генерированных светом фотоносителей, а также уменьшением доли отраженного излучения. Последние два фактора представляются нам определяющими в рассмотренной в настоящей работе системе твердотельный СЭ – электролит.

ЛИТЕРАТУРА

1. M.A.Green et al. Prog. Photovolt. Res. Appl., 8, 35 (1998).
2. **В.М.Арутюнян.** В сб. Фотокаталитическое преобразование солнечной энергии (под ред. К. И. Замараева и В. Н. Пармона). Новосибирск, Наука, 1991, с.228.
3. **В.М.Арутюнян.** В сб. Фотоприемники и фотопреобразователи (под ред. Ж.И.Алферова и Ю.В.Шмарцева). Ленинград, Наука, 1986, с.253.
4. **В.М.Арутюнян.** УФН, 158, 255 (1989).
5. **Ю.А.Абрамян, Г.Г.Карамян, Г.А.Мартоян, А.А.Мурадян, И.Д.Анисимова, В.И.Стафеев** Полупроводниковый фотоэлектрический генератор и способ его изготовления. Патент Армении № 550, 1998.

6. **И.М.Викулин, В.И.Стафеев.** Физика полупроводниковых приборов. М., Радио и связь, 1990.
7. **А.Фаренбрук, Р.Бьюб.** Солнечные элементы. М., Энергоатомиздат, 1987.
8. **М.А.Анго.** Инфракрасные излучения. М., Госэнергоиздат, 1957.
9. **Ф.Ф.Волькенштейн.** Электронные процессы на поверхности полупроводников при химадсорбции. М., Наука, 1987.

ՆՈՐ ՄՈՏԵՑՈՒՄ ԱՐԵԳԱԿՆԱՅԻՆ ԷԼԵՄԵՆՏՆԵՐԻ ԱՐԴՅՈՒՆԱՎԵՏՈՒԹՅԱՆ ԲԱՐՁՐԱՑՄԱՆ ՀԻՄՆԱԽՆԴՐԻՆ

Յու.Ա. ԱԲՐԱՀԱՄՅԱՆ, Վ.Ի. ՍԵՐԱԳՈ, Վ.Մ. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Ի.Դ. ԱՆԻՍԻՄՈՎԱ, Վ.Ի. ՍՏԱՖԵԵՎ, Գ.Գ. ՔԱՐԱՄՅԱՆ, Գ.Ա. ՄԱՐՏՈՅԱՆ, Ա.Ա. ՄՈՒՐԱԴՅԱՆ

Աշխատանքում նկարագրված է արեգակնային էլեմենտների (ԱԷ), մասնավորապես, առավել տարածված սիլիցիումային ԱԷ, ՕԳԳ-ի բարձրացման երևույթը ԱԷ մակերևույթը իզոտրոպ հեղուկ մեկուսիչով ծածկելու դեպքում։ Վերջինիս առկայությունը բերում է ԱԷ արդյունավետության 40-60% աճի սկզբնական արժեքի համեմատ։ Վերլուծված են ԱԷ վոլտ-ամպերային բնութագրերը, լցման գործակիցը և այլ բնութագրերը։ Քննարկված են ԱԷ արդյունավետության բարձրացման մեխանիզմները։

NEW APPROACH TO THE PROBLEM OF INCREASE IN THE EFFICIENCY OF SOLAR CELLS

YU.A. ABRAMIAN, V.I. SERAGO, V.M. AROUTIOUNIAN, I.D. ANISIMOVA, V.I. STAFEEV, G.G. KARAMIAN, G.A. MARTOYAN, A.A. MOURADIAN

We described the effect of increase in the efficiency of solar cells, in particular, widely used silicon solar cells based on the cells immersing in isotropic liquid insulator. The presence of a thin film of the latter leads to the increase in the solar cell efficiency value by 40–60% of it. Current–voltage characteristics, fill factor and other parameters of solar cells are analyzed. Mechanisms of the increase in the efficiency of solar cells are discussed.

Известия НАН Армении, Физика, т.34, №5, с.291-295 (1999)

УДК 621.039.512

РАСЧЕТ ДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ТРЕХМЕРНОМ ЯДЕРНОМ РЕАКТОРЕ МЕТОДОМ ПРОСЛЕЖИВАНИЯ НЕЙТРОННЫХ ПОТОКОВ

А.В. ОВСЕПЯН, Д.В. РАЙСЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 24 марта 1998 г.)

Описана полная программная реализация метода расчета нестационарных процессов в ядерном реакторе с трехмерной гетерогенной активной зоной, представленном в работе [1]. На его основе проведен расчет для модельной задачи и приведены некоторые результаты вычислений.

Введение. В работе [1] нами был предложен новый численный метод расчета нестационарных процессов в реакторе с трехмерной геометрией. Было дано общее оисание метода, его реализация была разбита на две части и было приведено описание первой – нахождение функций отклика с разных сторон ячейки на единичный сигнал в виде падающего на одну из граней пучка нейтронов. В настоящей статье рассматривается вторая часть метода – связывание входящих и исходящих потоков и прослеживание их во времени с целью получения картины динамики реактора. Поэтому для понимания данной работы необходимо знакомство с работой [1]. Изложение основано на конкретной программной реализации метода.

Описание реализации. В статье [1] реактор был разбит на ячейки в виде шестигранных призм (в дальнейшем именуемых шестигранниками) и был описан алгоритм получения функций отклика на единичный сигнал для такой ячейки. Покажем теперь, как, имея эти функции, можно проследить динамику реактора. Для этого необходимо осуществить связывание исходящих импульсов каждого шестигранника с входными импульсами его соседей. А для этого, в свою очередь, нужно сначала четко определить положение шестигранников друг относительно друга. В принятом разбиении цилиндр реактора оказывается поделенным на горизонтальные слои, каждый из которых представляет собой структуру, приведенную на рис.1. В согласии с геометрией задачи, в реакторе вводится косоугольная система координат: ось Z направлена по оси цилиндра реактора, а оси X и Y перпендикулярны ей и направлены под углом 60° друг к другу так, как показано на рис.1. Начало координат находится в середине призмы, поэтому число призм N_Z по оси Z берется нечетным. Тогда положение каждой ячейки можно охарактеризовать тремя целыми числами, представляющими собой координаты, отсчитываемые в минимальных расстояниях между центрами шестигранников в соответствующих направлениях. Как видно, структура, представленная на рис.1, так же, как и реальный реактор в поперечном сечении, имеет центральную симметрию шестого порядка относительно выбранного начала координат, поэтому в каждом слое шестигранников достаточно рассмотреть лишь группу, выделенную на рис.1. Аналогично для многих задач можно ограничиться рассмотрением верхней половины реактора, считая нижнюю ее зеркальным отражением относительно центрального сечения реактора. Таким образом, на деле мы рассматриваем лишь двенадцатую долю реактора, что сильно сокращает объем необходимого машинного времени и требования к оперативной памяти. Таким образом, цилиндр реактора будет представлять из себя структуру из $\frac{(N_Z+1)}{2}\left(\frac{(N_R+1)N_R}{2}+1)\right)+N_{ROUND}$ шестигранников, где N_Z – полное число призм по Z, N_R – их число по оси X или Y (без центрального), а $N_{ROUND}=f(N_R)$ – число призм, которые необходимо добавить для наилучшей аппроксимации круглой границы реактора.

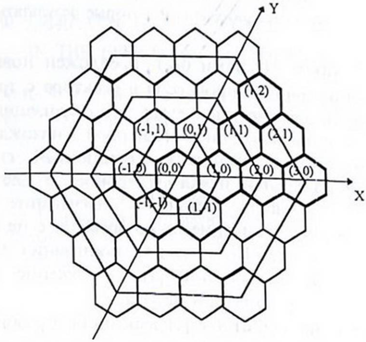


Рис.1. Поперечное сечение реактора в принятом разбиении (изображены лишь центральные ячейки).

Каждую ячейку будем характеризовать восемью числами, представляющими собой величины входных потоков с ее граней в данный момент, и восемью функциями (также по одной на каждую грань), представляющими из себя суммарный отклик на импульсы, приходившие в предшествующие текущему моменты времени. Каждая из этих функций задается в виде n значений исходящего потока в n последующих моментов времени; n должно быть равно числу значений в функциях отклика на единичный сигнал, полученных в первой части [1]. При расчетах n обычно полагалось равным восьми или десяти.

Для внесения соответствия между исходящими потоками шестигранников и входными потоками их соседей стороны шестигранников нумеруются следующим образом: боковые грани получают номера от 1 до 6 по часовой стрелке, седьмой стороной считается нижнее основание, а восьмой – верхнее. Тогда исходящий поток со стороны 7 какой-либо ячейки является входным потоком со стороны 8 ее нижнего соседа; исходящий поток со стороны 8 является входным со стороны 7 для верхнего соседа. Аналогичным образом с потоками стороны i $(i=1,\dots,3)$ связаны потоки стороны $i+3$.

Процесс вычислений выглядит так. Вначале задается некоторое распределение исходящих потоков. Оно определяется начальным значением $\Phi_0(t=0,\mathbf{r})$ плотности потока нейтронов. Затем по исходящим потокам шестигранников определяются входные потоки их соседей. Таким образом, последовательно рассматривается каждый шестигранник и входному потоку с каждой его грани присваивается первое значение (т.е. значение для текущего момента времени) функции суммарного отклика с соответствующей стороны ячейки, примыкающей к этой грани. Если эта ячейка находится вне рассматриваемой области реактора, то в качестве нее берется ячейка, эквивалентная ей, но находящаяся внутри рассматриваемой области. При этом необходимо учесть, что отклик теперь нужно взять уже с другой грани. Если же сторона примыкает к границе реактора, то входной импульс, который ей нужно придать, определяется граничными условиями. Если на границе реактора есть отражатель, то в качестве входа с этой грани нужно задать соответствующую долю исходящего потока, определяемую свойствами отражателя; если отражателя нет, входной поток всегда задается равным нулю – нейтроны просто вылетают в окружающую среду; внутрь же из нее не поступают.

Затем делается шаг вперед по времени: массивы, представляющие суммарные функции отклика для каждой стороны, сдвигаются на одну позицию вперед. Таким образом, исходящий поток во второй интервал времени становится потоком в первый интервал, поток в третий интервал становится потоком во второй и так далее. Поскольку для каждой ячейки хранятся значения суммарных функций отклика в моменты времени от t до $t+n\Delta t$, где t – текущий момент времени, а Δt – шаг по времени, то это равносильно перенесению текущего момента вперед на шаг Δt.

Определив для данного момента времени входные импульсы для всех сторон, можно уже, воспользовавшись функциями отклика на единичный сигнал, полученными в первой части [1], построить исходящие импульсы, вернее дополнить суммарные функции откликами на входные импульсы в текущий момент. Для входного импульса с каждой грани каждой ячейки определяются отклики со всех граней этой ячейки и прибавляются к значениям суммарных функций отклика. Математически суммарные функции отклика с i-ой стороны $I_-^i(t)$ определяются так:

$$I_-^i(t)=\sum_{j=1}^{8}\int_0^t I_+^j(t')\varphi^{ij}(t-t')\,dt\,, \tag{1}$$

где $I_+^j(t)$ – входной импульс с j-ой стороны, а φ^{ij} – функции отклика на единичный сигнал. А проводимая процедура эквивалентна тому, что к интегралу от нуля до $t-\Delta t$ в формуле (1) прибавляется интеграл от $t-\Delta t$ до t, давая суммарный отклик в текущий момент.

И наконец, определяются и выводятся в файл относительные значения плотности потока нейтронов в реакторе: они считаются постоянными в пределах каждой ячейки. Согласно кинетической теории [2], они пропорциональны сумме откликов со всех сторон в последующие n интервалов времени.

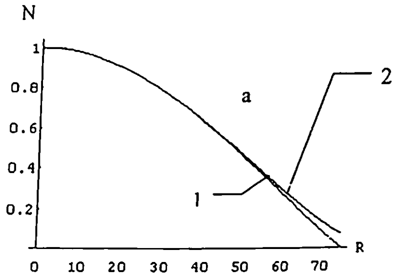
Затем процесс повторяется, начиная с определения входных потоков. Двигаясь вперед по времени, мы получаем пространственную картину распределения нейтронов в каждый момент времени $t_k = k\Delta t$ $(k \in N)$. Время, затрачиваемое на вычисления, зависит только от количества расчетных ячеек. Для реактора, содержащего 11 ячеек по высоте и 6 по радиусу, например, на один шаг по времени по составленной нами программе требуется около 0.5 сек.

Некоторые результаты расчетов. Рассмотрение динамической задачи в неоднородном реакторе сильно усложнило бы проверку полученных результатов. Поэтому для проверки метода с его помощью проведен расчет динамики однородного цилиндрического реактора и найдена плотность потока нейтронов $\Phi(t,\mathbf{r})$ в нем. Для удобства сравнения с аналитическим выражением параметры реактора взяты так, чтобы система была критической. Как известно [3], плотность потока нейтронов в критическом реакторе (стационарная задача) удовлетворяет уравнению $\nabla^2\Phi + B^2\Phi = 0$. Его аналитическое решение для реактора в виде однородного конечного цилиндра (при выполнении условия критичности $B^2 = (\nu_1 / \widetilde{R})^2 + (\pi / 2\widetilde{h})^2$) в цилиндрических координатах (ρ, φ, z) выглядит так:

$$\Phi(\rho, z) = CJ_0\left(\frac{\nu_1 \rho}{\widetilde{R}}\right) \cdot \cos\left(\frac{\pi z}{2\widetilde{h}}\right), \tag{2}$$

где C – нормировочный коэффициент, определяющийся мощностным режимом, $\nu_1 \approx 2.405$ – первый ноль функции Бесселя $J_0(x)$, $\widetilde{R}$ и $\widetilde{h}$ – соответственно экстраполированные радиус и полувысота цилиндра. Для расчета такого реактора в односкоростном приближении были взяты следующие параметры, с хорошей степенью точности удовлетворяюшие условию критичности и приближенные к реальным [4]: макроскопическое сечение деления $\Sigma_f = 0.0491$ см$^{-1}$, сечение радиационного захвата $\Sigma_c = 0.0486$ см$^{-1}$, сечение упругого рассеяния $\Sigma_s = 0.7918$ см$^{-1}$, размеры реактора $R = 75$ см, $h = 125$ см, скорость нейтронов $v = 2.965 \cdot 10^7$ см/сек, соответствующая энергии тепловых нейтронов $E = 0.25$ эВ. Поскольку нас интересует стационарное распределение нейтронов, то начальные значения потоков взяты произвольно.

В центре реактора был задан нейтронный импульс, затем в течение некоторого интервала времени (порядка 10 мсек) реактор эволюционировал к своему стационарному состоянию, плотность потока нейтронов в котором и должна совпасть с аналитическим выражением (2). Понятно, что смысл имеют лишь относительные значения плотности потока, поскольку абсолютные определяются произвольно заданными начальными условиями. На рис.2 приведены графики нормализованных функций распределения нейтронов по радиусу в центральном сечении (а) и по высоте на оси реактора (б) для аналитического решения и для численного. Как можно видеть, распределение нейтронов по радиус вблизи границы реактора отклоняетя от аналитического, что обусловле но разницей между цилиндрической и шестигранной геометриями н границе реактора. Ошибка для относительного распределения нейтро нов составляет 1%.



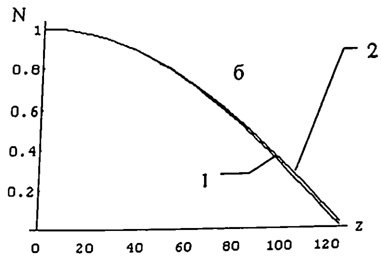


Рис.2. Функции распределения нейтронов по радиусу в центральном сечении реактора (а) и по высоте на его оси (б) (1 - аналитическое решение, 2 - численное). Длины даны в сантиметрах.

Понятно, что приведенная модельная задача отнюдь не исчерпывает возможностей метода и конкретное его применение обоснованно для многогрупповых быстрых динамических процессов в неоднородном реакторе. Поскольку цель данной работы - лишь предложить и описать метод, здесь такие расчеты не приводятся.

ЛИТЕРАТУРА

1. А.В.Овсепян, Д.В.Райсян. Известия НАН Армении, Физика, 34, 103 (1999).
2. Д.Р.Кипин. Физические основы кинетики ядерных реакторов. М., Атомиздат, 1967.
3. Р.Мегреблиан, Д.Холмс. Теория реакторов. М., Госатомиздат, 1962.
4. Эксплуатационные режимы водо-водяных энергетических ядерных реакторов. М., Атомиздат, 1979.

Известия НАН Армении, Физика, т.34, №5, с.296-302 (1999)

УДК 532.783

ЗАВИСИМОСТЬ ВЕЛИЧИНЫ СПОНТАННОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ, ИНДУЦИРОВАННОЙ ХИРАЛЬНЫМИ ДОБАВКАМИ В СМЕКТИЧЕСКИХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛАХ, ОТ КОНЦЕНТРАЦИИ И МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ КОМПОНЕНТОВ

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

(Поступила в редакцию 25 марта 1999 г.)

Институт прикладных проблем физики НАН Армении

Проведено исследование влияния молекулярной структуры компонентов и концентрации хиральных добавок на величину спонтанной поляризации в сегнетоэлектрических бинарных системах. Выявлена зависимость величины спонтанной поляризации, индуцированной хиральными добавками в смектик С-матрицах, от концентрации хиральных добавок. Показано, что условия, необходимые для возникновения спонтанной поляризации в бинарных смесях, налагаемые теорией на структуру молекул хиральной добавки, далеко не всегда реализуются.

С практической точки зрения большой интерес представляют сегнетоэлектрические жидкокристаллические бинарные системы, которые по сравнению с индивидуальными жидкокристаллическими сегнетоэлектриками обладают гораздо большей величиной спонтанной поляризации (P_C) и более широким температурным интервалом существования сегнетоэлектрической фазы. А с точки зрения направленного химического синтеза значительный интерес представляют исследования влияния молекулярной структуры компонентов сегнетоэлектрических систем на величину P_C.

В настоящей работе проведено исследование влияния концентрации хиральной добавки и молекулярной структуры компонентов на величину P_C в сегнетоэлектрических бинарных системах с различными концентрациями хиральных добавок (5, 7, 20, 25, 30%). В качестве смектических матриц выбраны 4-пентил-N-(4-пентилокси-2-гидроксибензилиден) амино – {16}; 4-октокси-4′-нонилазобензол – {18}, а в качестве хиральных добавок d-2-метилбутил-4-гептилоксибифенил-4′-карбоксилат – {15}; 4-(d-3-метилпентил)-4′-октилоксибифенил – {21}. Ниже приведены температуры фазовых переходов исследованных систем:

Кристалл (K_1) $\xrightarrow{34^0C}$ K_2 $\xrightarrow{46^0C}$ Смектик С*(См С*) $\xrightarrow{55^0C}$ Смектик А

(СмА) $\xrightarrow{60^0C}$ Хиральный нематик (ХН) $\xrightarrow{65^0C}$ Изотропная жидкость (ИЖ) – {16}/{21} (5, 7, 20%).

К $\xrightarrow{46^0C}$ См С* $\xrightarrow{55^0C}$ См А $\xrightarrow{60^0C}$ ХН $\xrightarrow{65^0C}$ ИЖ – {16}/{15} (5, 7, 20%).

К $\xrightarrow{49^0C}$ См С* $\xrightarrow{60^0C}$ См А $\xrightarrow{66^0C}$ ХН $\xrightarrow{72^0C}$ ИЖ – {18}/{21} (5, 7, 20%).

К $\xrightarrow{49^0C}$ См С* $\xrightarrow{60^0C}$ См А $\xrightarrow{66^0C}$ ХН $\xrightarrow{72^0C}$ ИЖ – {18}/{15} (5, 7, 20%).

Измерения зависимости величины P_C от температуры проводились переполяризационным методом Сойера–Тауэра [1]. Исследуемые вещества заливались в ячейки типа "сэндвич", стеклянным поверхностям которых предварительным натиранием дали планарную ориентацию. Толщина ячеек составляла 20 мкм. Для получения гомогенной ориентации ячейки с образцами нагревались в специальной термокамере до изотропной фазы. После чего термокамера (вместе с находящимися в ней ячейками) помещалась в сильное магнитное поле (1,2 Т), направление которого было параллельно направлению предварительного натирания ячеек. Медленно охлаждая ячейки до смектической фазы, магнитное поле снималось и только после этого проводилось измерение.

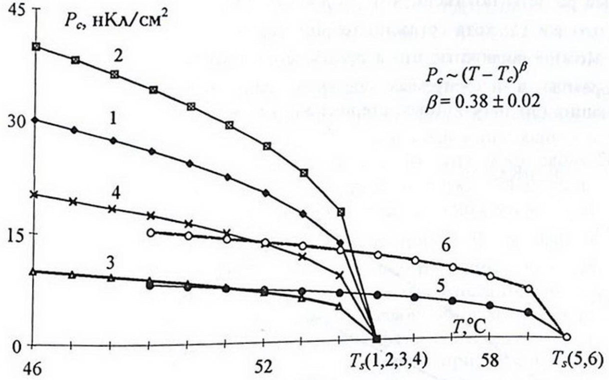


Рис.1. Температурные зависимости спонтанной поляризации в бинарных системах: 1 – {16}/{21}(5%), 2 – {16}/{21}(20%), 3 – {16}/{15}(5%), 4 – {16}/{15}(20%), 5 – {18}/{15}(5%), 6 – {18}/{15}(20%).

Результаты измерений приведены на рис.1. Сравнивая их с результатами измерения температурной зависимости величины P_C в жидкокристаллических сегнетоэлектриках {15} и {21}, представленными в работе [2], становится ясным, что исследуемые бинарные смеси обладают примерно в 10 раз большей величиной P_C, чем индивидуальные жидкокристаллические (ЖК) соединения. Значительно шире у них также температурный интервал существования сегнетоэлектрической фазы. Как видно из рис.1, в области фазового перехода в смектик А, где P_C исчезает, величина P_C изменяется непрерывным образом, что указывает на то, что в исследованных системах фазовый переход СмС* – СмА имеет черты фазового перехода второго рода. Отметим еще одну особенность, касающуюся хода температурной зависимости величины P_C в данных системах. Не являясь параметром сегнетоэлектрического фазового перехода (что характерно для несобственных сегнетоэлектриков), величина P_C в ЖК сегнетоэлектриках оказывается пропорциональной истинному параметру перехода [3]:

$$|P_C| \approx \chi |\mu_1 - \mu_2 q| \theta, \tag{1}$$

где χ – диэлектрическая восприимчивость, μ_1, μ_2 – коэффициенты пьезо- и флексоэффектов соответственно, q – волновой вектор шага спирали, θ – параметр порядка (угол наклона длинных осей молекул к смектическим слоям). Таким образом, с помощью рис.1 оценив критический показатель (β) в выражении $P_C \sim (T - T_C)^\beta$ (где T_C – температура фазового перехода СмС* – СмА), получим представление о порядке критического показателя γ из выражения $\theta \sim (T - T_C)^\gamma$. Приблизительные расчеты показали, что $\gamma \approx \beta \approx 0{,}38$. Обращает на себя внимание то, что $\gamma \neq 0{,}5$, хотя согласно теории фазовых переходов Ландау [4] $\gamma = 0{,}5$. Можно заключить, что в процессе сегнетоэлектрического фазового перехода в исследуемых системах существенна роль короткодействующих (дисперсионных, стерических) межмолекулярных сил.

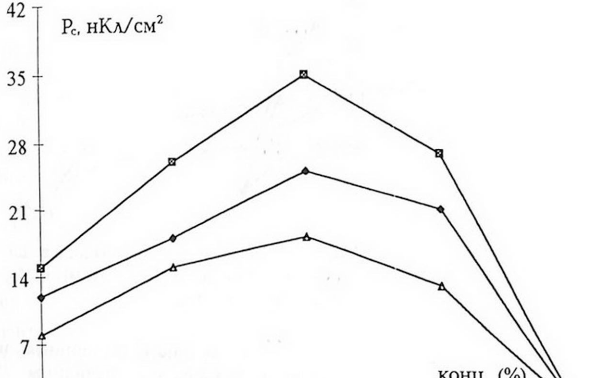
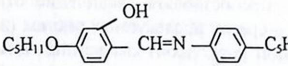
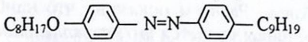
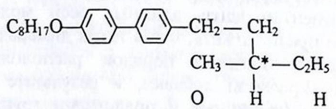
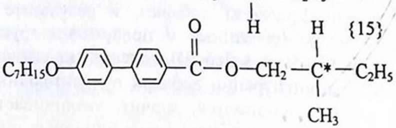


Рис.2. Зависимости спонтанной поляризации от концентрации хиральных добавок {15},{21}: 1 – {16}/{15}, 2 – {16}/{21}, 3 – {18}/{15}.

На рис.2 приведены зависимости величины P_C от концентрации хиральных добавок в бинарных системах при фиксированной температуре (52°C). Из рисунка видно, что величина P_C, индуцированная хиральными добавками в смектик С-матрице, имеет максимум при определенной концентрации добавок (20%). Такой ход поведения величины P_C в зависимости от концентрации добавки объясняется, видимо, тем, что увеличение концентрации хиральной добавки до определенного значения (20%) приводит к увеличению поперечного дипольного момента молекул в смектических слоях. Такому увеличению, как показали расчеты энергии парного взаимодействия молекул, проведенные методом атом-атом потенциалов [5], может способствовать увеличение относительного количества образующихся в средах исследуемых систем (в связи с энергетически наиболее выгодной упаковкой) смешанных димеров с повышением концентрации добавок. Расчеты показали, что наиболее выгодной упаковкой в смешанных парах является антипараллельное (по отношению к дипольным моментам вдоль длинных осей молекул) расположение молекул. Можно предположить, что в таких димерах возникает антисегнетоэлектрический ближний порядок расположения диполей молекул матрицы и хиральной добавки, в результате чего поперечные дипольные моменты (связанные с полярными группами СОО (2,5 Дебай), ОН (1,7 Дебай), CH_3 (0,8 Дебай)) молекул складываются. И, поскольку с повышением концентрации добавок относительное количество смешанных димеров увеличивается, значит, увеличивается и суммарный дипольный момент в смектических слоях бинарных систем. Однако, как видно из рис.2, выше 20%-ой концентрации добавок (25%) в исследованных системах P_C уменьшается и при 30%-ой концентрации добавок исчезает вовсе. Такое поведение P_C в бинарных системах, видимо, объясняется тем, что увеличение поперечного дипольного момента молекул выше определенной концентрации добавок приводит к сильному уменьшению угла наклона молекул к смектическим слоям. Такое уменьшение угла наклона молекул и приводит к уменьшению, а затем и к исчезновению P_C в исследуемых системах (поскольку, как уже отмечалось в начале работы, в ЖК сегнетоэлектриках P_C оказывается пропорциональной углу наклона молекул к смектическим слоям (см. формулу (1)). Отметим, что микроскопические исследования показали, что при 25%-ой концентрации хиральных добавок температурный интервал существования наклонной смектической фазы в исследуемых системах сужается по сравнению с таким же интервалом при 20%-ой концентрации добавок. А при 30%-ой концентрации наклонная смектическая фаза переходит в смектик А фазу.

Обсудим вопросы, касающиеся влияния молекулярной структуры компонентов на величину P_C в исследованных смесях. Для этой цели в таблице 1 приведены химические формулы компонентов систем, а также значения величины P_C при фиксированной температуре (52°C) и при одинаковых концентрациях (20%) хиральных добавок. Как видно из таблицы, наибольшей величиной P_C обладает система {16}/{21}(20%). Этот факт выглядит довольно неожиданным, если учесть то обстоятельство, что молекулярная структура хиральной добавки {21}

Таблица 1. Химические формулы индивидуальных соединений и значения спонтанной поляризации P_C в бинарных смесях при $T = 52°$ C.

Химические формулы	Бинарные смеси	P_C, нКл/см^2
 {16}  {18}  {21}  {15}	{16}/{21}(20%)	25
	{16}/{15}(20%)	18
	{18}/{15}(20%)	13
	{18}/{21}(20%)	...

(см. табл.1) не удовлетворяет тем условиям (налагаемым теорией), которые необходимы для возникновения большой P_C в бинарных системах смектических матриц с хиральными добавками. Напомним, что этими условиями являются: а) способность вещества с длинными алкильными хвостами образовать смектическую фазу со спонтанным наклоном молекул; б) наличие хирального фрагмента (асимметричный атом углерода); в) присутствие по возможности большого поперечного дипольного момента, обеспечивающего вклад в P_C через величину пьезоэлектрического и флексоэлектрического коэффициентов [6]. Как видно из табл.1, пункт в) из перечисленных условий в молекулярной структуре {21} не реализуется. Вещество {21}, хотя и обладает слабыми сегнетоэлектрическими свойствами [2], но не имеет жестко связанного поперечного дипольного момента молекул вблизи асимметричного атома углерода. Появление в системе {16}/{21}(20%) такой большой величины P_C можно объяснить структурными особенностями матрицы {16}. Важность структурных особенностей обусловлена тем, что, как показали расчеты на ЭВМ [5], именно благодаря наличию полярной группы ОН у бензольного кольца остова молекул матрицы {16} и группы CH_3 в концевом фрагменте молекул добавки {21}, энергетически наиболее выгодной упаковкой является антипараллельное расположение молекул в образующихся смешанных димерах (для антипараллельного расположения $E_{min} = -17{,}55$ ккал/моль, а для параллельного – $E_{min} = -9{,}23$ ккал/моль). Резонно предположить, что при таком расположении молекул в смешанных парах, в связи с антисегнетоэлектрическим ближним порядком расположения диполей молекул, поперечные дипольные моменты, связанные с полярными группами CH_3 и OH, суммируются. Это приводит к возникновению большой P_C в смектических слоях бинарной системы. Интересен тот факт, что, как видно из табл.1, хиральная добавка {15}, хотя и имеет жестко связанный с хиральным фрагментом поперечный дипольный момент, связанный с карбоксильной группой COO, в смесях с матрицей {16} обладает меньшей величиной P_C, чем добавка {21} в смесях с матрицей {16} (при одинаковых концентрациях добавок {15} и {21}). Можно предположить, что это обстоятельство связано со структурными особенностями добавки {15}. Расчеты показали, что наличие COO группы в остове молекул добавки {15} приводит к тому, что энергия парного взаимодействия в димерах, состоящих из молекул матрицы {16} и добавки {15} меньше (E_{min} = – 16,48 ккал/моль), чем в димерах, состоящих из молекул матрицы {16} и добавки {21} (E_{min} = = – 17,55 ккал/моль) [5]. В связи с этим относительное количество смешанных димеров с антипараллельной упаковкой молекул в среде системы {16}/{15} уменьшается по сравнению с таким же количеством смешанных димеров в среде системы {16}/{21}. А как уже отмечалось, именно благодаря антипараллельной упаковке молекул в димерах возникает антисегнетоэлектрический ближний порядок расположения диполей молекул, в результате чего поперечные дипольные моменты суммируются. Понижение значения P_C при замене в смесях с матрицей {16} добавки {21} веществом {15}, можно объяснить также тем обстоятельством, что, как показывают расчеты, в среде системы {16}/{15} энергетически одинаково выгодны как параллельная, так и антипараллельная упаковка молекул в смешанных парах (разность значений минимальной энергии (ΔE_{min}) составляет не более 0,7 ккал/моль). А это, в свою очередь, приводит к дополнительному уменьшению относительного количества смешанных димеров с антипараллельной упаковкой молекул. О влиянии структурных особенностей компонентов исследованных систем на величину P_C говорят также те факты (см. табл.1), что хиральная добавка {15} в смеси с матрицей {16} обладает большей величиной P_C, чем в смеси с матрицей {18}, а добавка {21} в смеси с матрицей {18} вообще не обладает спонтанной поляризацией. Первый факт, видимо, можно объяснить тем, что для системы {18}/{15} вышепредложенная модель увеличения P_C в смектических слоях теряет смысл, поскольку в молекулярной структуре матрицы {18} отсутствует поперечная полярная группа (см. табл.1). А это в свою очередь приводит к тому, что P_C системы {18}/{15} уменьшается по сравнению с P_C системы {16}/{15}, для которой указанную модель (как было показано выше) можно считать правильной. Что касается объяснения второго факта, то, по-видимому, его можно связать как с отсутствием поперечной полярной группы в структуре молекул матрицы {18}, так и со структурой добавки {21}, которая не удовлетворяет необходимым условиям, налагаемым теорией на структуру хирального смектика для возникновения большой P_C.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Б.А.Логинов, Г.С.Чилая.** ПТЭ, **6**, 24 (1987).
2. **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).
3. **С.А.Пикин, В.Л.Инденбом.** УФН, **125**, 251 (1978).
4. **А.С.Сонин.** Введение в физику жидких кристаллов. М., Наука, 1983.
5. **А.Ц.Саркисян, К.К.Варданян, З.В.Багдасарян, С.М.Яйлоян.** Изв. НАН Армении, Физика, **34**, 109 (1999).
6. **Л.М.Блинов, Л.А.Береснев.** УФН, **134**, 391 (1984).

ԽԻՐԱԼԱՅԻՆ ԱՎԵԼՑՈՒԿՆԵՐԻ ԿՈՂՄԻՑ ՍՄԵԿՏԻԿ ՀԵՂՈՒԿ ԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐՈՒՄ ՄԱԿԱԾՎԱԾ ՍՊՈՆՏԱՆ ԲԵՎԵՌԱՑՄԱՆ ՄԵԾՈՒԹՅԱՆ ԿԱԽՎԱԾՈՒԹՅՈՒՆԸ ԲԱՂԱԴՐԻՉՆԵՐԻ ԿՈՆՑԵՆՏՐԱՑԻԱՅԻՑ ԵՎ ՄՈԼԵԿՈՒԼԱՅԻՆ ԿԱՌՈՒՑՎԱԾՔԻՑ

Ա. Ց. ՍԱՐԳՍՅԱՆ, Կ. Կ. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ, Զ. Վ. ԲԱՂԴԱՍԱՐՅԱՆ,
Լ. Ս. ԲԵԺԱՆՈՎԱ, Ս. Մ. ՅԱՅԼՈՅԱՆ

Կատարված է սեգնետաէլեկտրական բինար համակարգերում բաղադրիչների մոլեկուլային կառուցվածքի և խիրալային ավելցուկների կոնցենտրացիայի սպոնտան բևեռացման մեծության վրա ազդեցության հետազոտություն: Բացահայտված է սմեկտիկ C-մատրիցներում խիրալային ավելցուկների կողմից մակածված սպոնտան բևեռացման մեծության խիրալային ավելցուկների կոնցենտրացիայից ունեցած կախվածությունը: Ցույց է տրված, որ բինար համակարգերում սպոնտան բևեռացման առաջացման համար տեսության կողմից խիրալային ավելցուկի մոլեկուլյար կառուցվածքի վրա դրված անհրաժեշտ պայմանները միշտ չէ որ իրագործվում են:

DEPENDENCE OF SPONTANEOUS POLARIZATION INDUCED BY CHIRAL ADDINGS IN SMECTIC LIQUID CRYSTALS ON THE CONCENTRATION AND MOLECULAR STRUCTURE OF COMPONENTS

A. TS. SARKISSYAN, K. K. VARTANYAN, Z. V. BAGHDASARYAN,
L. S. BEZHANOVA, S. M. YAYLOYAN

An investigation of influence of components molecular structure and concentration of chiral addings on the spontaneous polarization is carried out. The dependence of the spontaneous polarization induced by chiral addings in smectic C matrixes on the concentration of chiral addings is revealed. It is shown that in binary systems the needed conditions inflicted by theory on the molecular structure of chiral adding are not always realized.

Известия НАН Армении, Физика, т.34, №5, с.303-307 (19

УДК 541.49

КЛАСТЕРИЗАЦИЯ В РАСШИРЯЮЩЕЙСЯ СВЕРХЗВУКОВОЙ СТРУЕ АРГОНА

А.С.ТЕР-АВЕТИСЯН, Г.Ц. НЕРСИСЯН, В.О. ПАПАНЯН

Институт физических исследований НАН Армении

(Поступила в редакцию 17 мая 1998 г.)

Проведено экспериментальное исследование образования кластеров аргона, возбужденных электронным пучком, в расширяющейся сверхзвуковой струе. Разработан быстродействующий электромагнитный клапан для управления потоком кластеров, формирующихся за сверхзвуковым соплом при истечении газа через него. Установлено, что средний размер кластеров меняется от 10^3 до 10^4 атом/кластер, при прохождении атомов аргона через сверхзвуковое конообразное сопло диаметром d = 0.08 мм, когда давление источника меняется от 5 до 15 атм, а температура от 77 до 273 K.

Когда газ расширяется, проходя через сверхзвуковое сопло в вакуум, его тепловая энергия превращается в направленную кинетическую энергию сверхзвуковой струи. Условие расширения газа становится сверхнасыщенным и происходит его конденсациюя. Получается так называемый конденсированный молекулярный пучок или пучок кластеров [1] с размерами (число атомов в кластере) от димера до микро-капли или -кристалла с многомиллионными атомами, поддерживаемыми силами Ван дер Ваальса. Они отличаются от обычных атомных пучков большим потоком массы и высокой однородностью частиц по скоростям [2], что делает их пригодными в разных областях науки и техники [3,4].

Настоящая работа посвящена исследованию условий получения кластерных образований в сверхзвуковой струе с целью использования полученных значений размеров кластеров в качестве градуированных кривых для определения размеров кластеров других инертных газов по законам теории "соответствующих струй" [5]. Эти измерения необходимы для дальнейших экспериментальных исследований ВУФ спектров инертных газов.

Газовый пучок при давлениях 5-15 атм и температурах источника 77-273 K, проходя через конообразное сверхзвуковое сопло диаметром 0.8 мм и длиной сверхзвуковой части 20 мм, направлялся в высоковакуумную камеру после предварительного отделения квазистационарного ядра сверхзвуковой струи скиммером диаметром 0.5 мм (рис.1), где пучок пересекался электронным пучком с диаметром 4 мм, энергией 2 кэВ и током 10 мА. Давление в области сопло-скиммер 10^{-2} Тор, в камере – 10^{-5} Тор. Расстояние мехду выходом сопла и скиммером 15 мм, а между скиммером и ионизационным детектором (цилиндр Фарадея) 40 мм. Распределение кластерных образований в сверхзвуковой струе по размерам зависит от давления и температуры источника, геометрии сопла и условий истечения газовой струи. Для аргона атомная масса m = 40 а.е.м., f = 3 (где $f \equiv 2/(\gamma-1)$, а $\gamma = c_p / c_v$ есть отношение теплоемкостей (адиабатическая постоянная), для одноатомных газов $\gamma = 5/3$ и для двухатомных газов – 7/5). При параметрах источника T_0 = 270 К и P_0 = 15 атм (плотность $n_0 = 3.98 \cdot 10^{20}$ см$^{-3}$) длина свободного пробега $\lambda_0 = 4.3 \cdot 10^{-7}$ см, параметр Кнудсенда $Kn_0 = 5.4 \cdot 10^{-5}$. Интенсивность истечения газа через сопло $J_0 = 3.46 \cdot 10^{22}$ атом/с. Значения скоростей изменения температуры T от времени t и расстояниях x соответственно $dT/dt = 4.8 \cdot 10^6$ К/с, dT/dx = 66 К/см, а относительная плотность атомов n сверхзвуковой струи на расстоянии 5.5 см от среза сопла, где расположен ионизационный детектор, равна $n/n_0 = 3.17 \cdot 10^{-7}$, максимальная скорость $v_{max} = 5.32 \cdot 10^4$ см/с, длина свободного пробега λ = 0.47 см. Можно оценить размер кластеризации для таких условий эмпирическим параметром Хагены [9]:

$$\Gamma^* = k \frac{(d / \text{tg}\alpha)^{0.85}\, p_0}{T_0^{2.29}}, \quad (1)$$

где d – диаметр критического сечения сопла в мкм (80 мкм), α – полуугол расширения (для нашего сопла $\alpha = 5^\circ$) и k – эмпирическая константа ($k \approx 1700$ для Ar [7]). Кластеризация начинается, когда $\Gamma^* \sim 300$

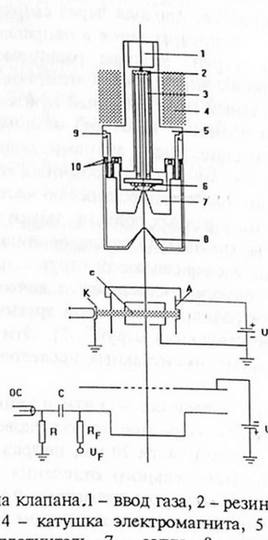


Рис.1. Схема клапана.1 – ввод газа, 2 – резиновые амортизаторы, 3 – якорь, 4 – катушка электромагнита, 5 – корпус, 6 – тефлоновый уплотнитель, 7 – сопло, 8 – скиммер, 9 – откачка, 10 – резиновые уплотнители, K – катод электронной пушки, A – анод, e – пучок электронов, OC – осциллограф.

[5,7], а при $\Gamma^* > 5\cdot10^4$ [5] размеры кластеров > 10^4 атом/кластер.
параметр для Ar меняется от ~ $7\cdot10^3$ до $2\cdot10^4$ при температуре 273 K и
$1.3\cdot10^5$ до $4\cdot10^5$ при температуре 77 K, когда давление источника меня
от 5 до 15 атм.

Во избежание больших затрат газа, сопло снабжено электром
нитным импульсным клапаном (рис.1), обеспечивающим управлени
оптимизацию режима истечения газа через сопло. Эксперименты про
дились при длительности импульса 15 мс и частоте повторения
импульс за 4 с. Сопло охлаждалось жидким азотом, проходящим че
трубку, намотанную вокруг сопла. Температура сопла T_0 поддерживал
постоянным контролированием количества азота, проходящего че
медную трубку.

Для регистрации размеров кластеров на пути к детектору о
ионизировались электронным пучком (рис.1.) с энергией 2 кэВ и ток
10 мА. Основной принцип измерения [8] можно просуммировать сл
дующим образом. Пучок кластеров, проходя через электронный пучо
частично ионизируется и попадает в замедляющее поле электродн
системы. При положительном замедляющем потенциале
относительно потенциала в зоне ионизации только те кластеры мог
достигнуть ионного детектора, которые благодаря своим размера
имеют достаточную кинетическую энергию E_k для преодолени
потенциального барьера:

$$E_k = Nmv^2/2 \geq ZeU_F\,, \quad (2$$

где Nm – масса кластерного иона, m – масса атома, Z – заряд каждого
кластерного иона, e – заряд электрона, U_F – отражающий потенциал, v –
скорость течения кластерного пучка, которая выражается следующей
формулой [9]:

$$v = v_{\max} = \left((f+2)/2\right)^{0.5}\left(2kT_0/m\right)^{0.5}. \quad (3)$$

Измерения в работах [10,11] показали, что разброс скорости v в пучке не более 10% от $v_{\max}$. Таким образом, “характерный размер” кластеров $(N/Z)^*$ определяется из условия (2):

$$(N/Z)^* = 2eU_F/(mv^2). \quad (4)$$

Для расчета бралось то значение отражающего потенциала U_F, при котором ионный ток составлял половину максимума регистрируемого ионного тока.

Для исключения попадания на детектор (цилиндр Фарадея) рассеянных электронов и каких-либо других заряженных частиц перед детектором ставился дополнительный электрод с отрицательным потенциалом U_0, значение которого предварительно определялось, исследуя его зависимость от ионного тока I_i при разных значениях отражающего потенциала U_F (рис.2). Ионный ток I_i цилиндра Фарадея – это суммарный ток заряженных частиц (ионов Γ^+ и электронов Γ, $I_i = \Gamma^+ + \Gamma$), достигающих детектора. Как видно, до значения $U_0 \leq -30$ В ионный ток I_i не меняется, а при $U_0 > -30$ В ионный ток уменьшается, что обусловлено в основном увеличением числа электронов, регистрируемых цилиндром

Фарадея. Значение $U_0 = -30$ В не меняется для разных U_F и поэтому во всех других случаях для отрицательного потенциала бралось значение $U_0 = -30$ В.

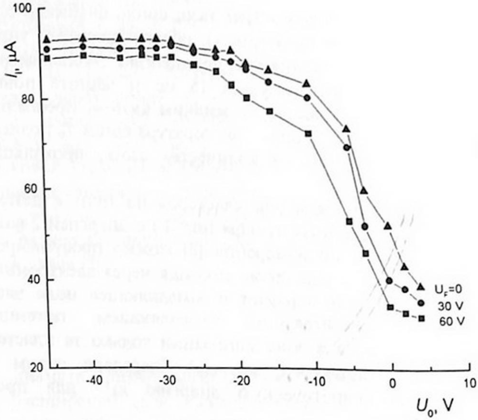


Рис.2. Зависимость отрицательного потенциала U_0 от ионного тока I_i при разных значениях отражающего потенциала U_F.

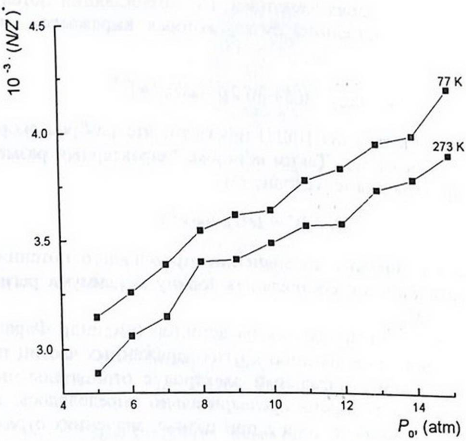


Рис.3. Зависимости изменения "характерного размера" кластеров $(N/Z)^*$ от давления при двух значениях температуры источника.

На рис.3 представлены экспериментально полученные зависимости изменения "характерного размера" кластеров $(N/Z)^*$ от давления при двух значениях температуры источника. Конечно, $(N/Z)^*$ зависит и от энергий ионизирующих электронов, которые определяют кратность ионизаций, и поэтому для получения среднего размера нейтральных кластеров необходимы измерения $(N/Z)^*$ при разных энергиях электронов, как обсуждалось в [8]. Однако измерения для энергий электронов в области 1.5 – 2.3 кэВ не привели к существенным изменениям значений отражающего потенциала (значения $(N/Z)^*$ не менялись, то есть кратность ионизации не менялась), а уменьшался лишь ионный ток, что обусловлено увеличением числа "разбрызгивающихся" кластеров. Однако целью данной работы, как уже отмечалось, является не исследование процессов образования кластеров в сверхзвуковой струе, а определение условий получения кластерных образований аргона, которые использованы в качестве градуировочных кривых для определения размеров кластеров других инертных газов, необходимых для спектроскопических исследований кластеров.

Работа выполнена при финансировании из государственных централизованных источников Республики Армения в рамках научной темы 96-777 и при финансовой поддержке Фонда CRDF Cooperative Grants Program, грант No AE2-372.

ЛИТЕРАТУРА

1. E.W.Becker, K.Bier, W.Henkes, Z. Physik, **146**, 333 (1956).
2. O.F.Hagena. In: Molecular Beam and Low Density Gasdynamics (ed. P.P.Wegwner). New York, Dekker, 1974, pp.93-181.
3. E.W.Becker, H.D.Falter, O.F.Hagena, P.R.W.Henkes, R.Klingelhofer, H.O.Moser, W.Obert, I.Poth. In: Fusion Technology. Oxford, Pergamon Press, 1979, pp.331-337.
4. T.Takagi, K.Matsubara, H.Takaoka, I.Yamada. Thin Solid Films, **63**, 41 (1979).
5. O.F.Hagena, W.Obert, J.Chem. Phys., **56**, 1793 (1972).
6. O.F.Hagena. Rev. Sci. Instrum., **63**, 2374 (1992).
7. J.Wormer, V.Guzielski, J.Stapelfeld, T.Moller. J. Chem. Phys., **75**, 402 (1981).
8. H.Falter, O.F.Hagena, W.Henkes, H.V.Wedel. Int. J. Mass. Spectrom. Ion Phys., 4, 145 (1970).
9. O.F.Hagena. Surfase Science, **106**, 101 (1981).
10. E.W.Becker, R.Klingelhofer, P.Lohse. Z. Narurforsch., **17a**, 432 (1962).
11. H.Burghoff, O.F.Hagena. Z. Naturforsch., **20a**, 1135 (1965).

CLUSTERIZATION IN EXPANDING SUPERSONIC ARGON JET

S.A. TER-AVETISYAN, G.TS. NERSISYAN, V.O. PAPANYAN

An experimental study of cluster formation is carried out in expanded supersonic argon jet excited by electron beam. A fast electromagnetic valve controlling flow of cluster formed behind the supersonic nuzzle is designed and constructed. It is established that the average cluster size is varied from 10^3 to 10^4 atom/cluster when atoms of argon pass through the supersonic conical nozzle with the throat diameter $d = 0.08$ mm at the backing pressure $5 \le P_0 \le 15$ atm and temperature $77 \le T_0 \le 273$ K.

Известия НАН Армении, Физика, т.34, №5, с.308-313 (1999)

УДК 621.382.2

ФОТОПРОВОДИМОСТЬ БИПОЛЯРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУР С УЧЕТОМ ПОВЕРХНОСТНОЙ РЕКОМБИНАЦИИ

Р.С. АСАТРЯН, Г.С. КАРАЯН, А.А. МАКАРЯН

Ереванский государственный университет

Изучено изменение координатного распределения неосновных носителей тока в базовых областях неоднородных многослойных полупроводниковых структур с учетом поверхностной рекомбинации при наличии внешнего оптического излучения. Показано, что влияние поверхностной рекомбинации на электрофизические параметры биполярных многослойных структур не связано с внешним излучением.

В современной оптоэлектронике и фотонике существует тенденция уменьшения размеров, в частности, толщин используемых материалов, с одной стороны, и увеличения их чувствительности и быстродействия, с другой стороны. Такая необходимость обусловлена в первую очередь требованиями, предъявляемыми к элементной базе оптической компьютерной техники.

Для рассмотрения влияния поверхностной рекомбинации на фотопроводимость, которое при малой толщине слоя полупроводника h может оказаться существенным, достаточно исследовать многослойную $p-n-p-n$-структуру с одним оптическим окном (рис.1). Поглощение падающего излучения будем считать однородным по всему объему полупроводника. Это предположение, не умаляя общности решения задачи, дает возможность избежать громоздких формул, при этом сохраняя особенности влияния поверхностной рекомбинации и света на процесс токопрохождения в неоднородных полупроводниковых структурах.

Скорость рождения фотогенерированных носителей при монохроматическом освещении с частотой υ можно задать формулой [1,2]

$$g(\upsilon, x) = \begin{cases} \dfrac{\alpha(\upsilon)\eta(\upsilon)I}{\varepsilon_0} \equiv g(\upsilon), & x \in [l_2, d_2], \\ 0, & x \notin [l_2, d_2]. \end{cases} \tag{1}$$

Здесь $\alpha(\upsilon)$ – коэффициент поглощения, $\eta(\upsilon)$ – квантовый выход, I – интенсивность освещения, ε_0 – энергия одного фотона, а l_k и d_k – координаты начала и конца k-ой базы структуры по направлению OX, соответственно. В случае немонохроматического света, когда $\upsilon \in [\upsilon_1, \upsilon_2]$, для скорости фотогенерации g_0 имеем

$$g_0 = \int_{\upsilon_1}^{\upsilon_2} g(\upsilon)d\upsilon .$$

Координатное распределение неосновных носителей $Y_k(x,z)$ в области $[l_k, d_k]$ рассматриваемой структуры (рис.2) описывается уравнением

$$D_k\left(\frac{\partial^2 Y_k}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 Y_k}{\partial z^2}\right)=\frac{Y_k-\overline{Y_k}}{\tau_k}-g\delta_2^k \qquad (2)$$

со следующими граничными условиями:

$$1.\ Y_k(l_k-0,z)\equiv Y_k(l_k+0,z)\equiv Y_k(l_k,z), \qquad 2.\ Y_k(d_k-0,z)\equiv Y_k(d_k+0,z)\equiv Y_k(d_k,z),$$

$$3.\ \frac{\partial Y_k(x,h)}{\partial z}=0,\ k=1,4, \qquad 4.\ \left[(-1)^{k+1}\frac{\partial}{\partial z}+\frac{S_k}{D_k}\right]\cdot\left[Y_k(x,h)-\overline{Y_k}\right]=0,\ k=2,3, \quad (3)$$

$$5.\ \frac{\partial Y_k(x,0)}{\partial z}=0,$$

где $\overline{Y_k}$ – равновесная концентрация, D_k – коэффициент диффузии, τ_k – время жизни, $L_k=\sqrt{D_k\tau_k}$ – диффузионная длина пробега неосновных носителей в данной области электронно-дырочной плазмы (или в k-ой базе), δ_2^k в уравнении (2) – символ Кронекера. Граничные условия (3.4) учитывают наличие рекомбинации на поверхности $z=h$ биполярной структуры [3].

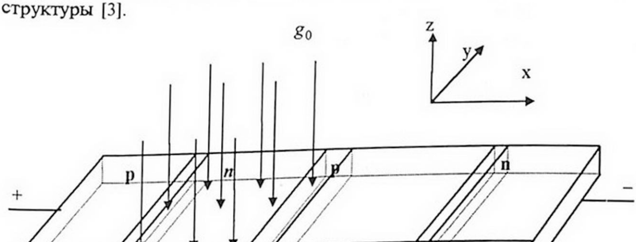


Рис.1. Планарная модель биполярной структуры с освещенной второй базой.

Следует отметить, что краевые условия (3.1) и (3.2), которые совпадают с аналогичными условиями работы [4], обусловлены специальным характером освещения. В силу условия (1), фотоны поглощаются лишь в квазинейтральной области, что выбрано с целью исследования структуры для применения в планарных микросхемах. В других случаях, когда фотоны поглощаются также в области объемного заряда, в правых частях условий (3.1)-(3.2) прибавляются постоянные слагаемые типа $b_k g_{ko}$, что не изменяет общую методику решения задачи.

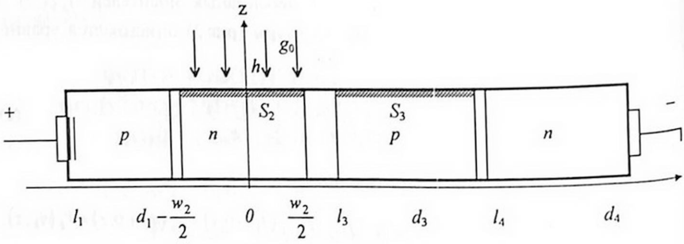


Рис.2. Расчетная модель четырехслойной структуры с учетом рекомбинации на поверхностях второй и третьей баз и с освещенной второй базой.

Если ввести обозначение

$$Y_k^F \equiv \overline{Y_k} + gL_k^2\delta_2^k, \tag{4}$$

то задачу (2)-(3) можно свести к "темновой" задаче со "световой " равновесной концентрацией Y_k^F. Вспомогательную функцию $\Phi_k(x,z)$ (см. [5]) с нулевыми граничными условиями можно построить следующим образом:

$$\Phi_k(x,z) = Y_k(x,z) - Y_k^F - \varphi_k(x), \tag{5}$$

где $\varphi_k(x)$ – решение одномерной задачи (2) с граничными условиями (3.1)-(3.2) без учета влияния поверхностной рекомбинации:

$$\varphi_k(x) = \frac{Y_k(l_k) - Y_k^F}{\operatorname{sh}\eta_k}\operatorname{sh}\frac{d_k - x}{L_k} + \frac{Y_k(d_k) - Y_k^F}{\operatorname{sh}\eta_k}\operatorname{sh}\frac{x - l_k}{L_k}, \tag{6}$$

где $\eta_k \equiv \frac{w_k}{L_k}$, $w_k = (d_k - l_k)$ – ширина k-ой базы.

Для вспомогательной функции $\Phi_k(x,z)$ задача (2) с граничными условиями (3) в обозначениях (4) и (5) примет следующий вид:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Phi_k(x,z) = \frac{\Phi_k(x,z)}{L_k^2}, \tag{7}$$

$$\Phi_k(l_k,z) = \Phi_k(d_k,z) = 0, \quad \frac{\partial\Phi_k(x,0)}{\partial z} = 0, \tag{8}$$

$$\frac{\partial\Phi_k(x,h)}{\partial z} = 0, \ k = 1,4, \quad \left[(-1)^{k+1}\frac{\partial}{\partial z} + \frac{S_k}{D_k}\right]\left[\Phi_k(x,h) + \varphi_k(x)\right] = 0, \ k = 2,3.$$

Так как с математической точки зрения данная задача ничем не отличается от задачи, когда учитывается только влияние поверхностной рекомбинации, а освещение отсутствует (см. систему (11) в работе [4]), для ее решения применим тот же метод Фурье-рядов. Функции $\Phi_k(x,z)$ и $\varphi_k(x)$, определенные в интервалах $[l_k, d_k]$, продолжим периодически с периодом w_k, со значениями 0 и $1/2[Y_k(l_k)+Y_k(d_k)]$ на границах, соответственно, а решение в k-ой области будем искать в виде бесконечного ряда:

$$\Phi_k = \frac{U_{0k}(z)}{2} + \sum_{n=1}^{\infty}\left[U_{nk}(z)\cos\frac{2n\pi x}{w_k} + V_{nk}(z)\sin\frac{2n\pi x}{w_k}\right]. \tag{9}$$

Коэффициенты Фурье-разложения U_{nk} и V_{nk} определяются стандартно:

$$U_{nk}(z) = \frac{1}{w_k}\int_{-\frac{1}{2}w_k}^{\frac{1}{2}w_k} \Phi_k(x,z)\cos\frac{2n\pi x}{w_k}\,dx,$$

$$V_{nk}(z) = \frac{1}{w_k}\int_{-\frac{1}{2}w_k}^{\frac{1}{2}w_k} \Phi_k(x,z)\sin\frac{2n\pi x}{w_k}\,dx, \qquad n = 0,1,2,\ldots \tag{10}$$

Подставляя разложение (9) в уравнение (7) и учитывая граничные условия (8), для функции $\Phi_k(x,z)$ получаем:

$$\Phi_k(x,z) = -\frac{2S_k\tau_k\left[Y_k(l_k)+Y_k(d_k)\right]}{w_k \operatorname{sh}\eta_k\left(\operatorname{sh}\dfrac{h}{L_k} + \dfrac{S_k L_k}{D_k}\operatorname{ch}\dfrac{h}{L_k}\right)}\operatorname{ch}\frac{z}{L_k} - \frac{S_k w_k}{2D_k}\times$$

$$\times\sum_{n=1}^{\infty}\left\{\left[Y_k(l_k)+Y_k(d_k)\right]\frac{w_k\left(\operatorname{ch}\eta_k - 1\right)\cos n\pi}{2L_k\operatorname{sh}\eta_k\operatorname{sh}\dfrac{2\lambda_{nk}h}{w_k}}\lambda_{nk}\mu_{nk}\cos\frac{2n\pi x}{w_k} + \left[Y_k(l_k)-Y_k(d_k)\right]\times\right. \tag{11}$$

$$\left.\times\frac{n\pi\cos n\pi}{\operatorname{sh}\dfrac{2\lambda_{nk}h}{w_k}}\lambda_{nk}\mu_{nk}\sin\frac{2n\pi x}{w_k}\right\}\operatorname{ch}\frac{2\lambda_{nk}}{w_k},$$

где $\lambda_{nk}^2 \equiv \left(n^2\pi^2 + \dfrac{w_k^2}{4L_k^2}\right)$; $\mu_{nk}^{-1} \equiv \lambda_{nk}^3\left(\lambda_{nk} + \dfrac{S_k w_k}{2D_k}\operatorname{cth}\dfrac{2\lambda_{nk}h}{w_k}\right)$.

Далее, учитывая (4) и (5), можно определить координатное распределение концентрации неосновных носителей $Y_k(x,z)$. При освещении базовых областей многослойных структур внешнее излучение меняет распределение носителей лишь в границах облучаемой базы, а также величины токов через непосредственные соседние переходы. В нашем случае, когда оптическое окно находится на поверхности второй базы, в диффузионном приближении для параметрической вольт-амперной характеристики рассматриваемой структуры в терминах токов насыщения переходов i_k и коэффициентов передачи носителей по базе β_k, получаем:

$$J_1 = i_1(\xi_1 - 1) + \beta_2 i_1 (1 - \xi_2) + J_1^{in} - (1 + a_2\beta_2 i_1) J_F,$$

$$J_2 = \beta_2 i_1(\xi_1 - 1) + \theta_2(1 - \xi_2) + \beta_3 i_3(\xi_3 - 1) + J_2^{in} + \left[1 + a_2(i_2^+ + \delta i_2)\right]^{-1} J_F, \quad (12)$$

$$J_3 = i_3(\xi_3 - 1) + \beta_3 i_3(1 - \xi_2) + J_3^{in},$$

где плотность фототока J_F определяется формулой

$$J_F = \frac{eD_2L_2}{\mathrm{sh}\eta_2} g_0 (\mathrm{ch}\eta_2 - 1), \quad (13)$$

а остальные обозначения приведены ниже:

$$i_k = i_{k0}^+ + i_{k+1,0}^+ + \delta i_{k+1} - \frac{a_k(i_{k+1,0} + \delta i_{k+1})^2}{1 + a_k(i_{k+1,0}^+ + \delta i_{k+1})}, \; i_{k0} = \frac{eD_k \overline{Y_k}}{L_k \mathrm{sh}\eta_k}, \; i_{k0}^+ = i_{ko}\mathrm{ch}\eta_k,$$

$$\theta_2 = \frac{i_{20}^+ + \delta i_2}{1 + a_2(i_{20}^+ + \delta i_2)} + \frac{i_{30}^+ + \delta i_3}{1 + a_3(i_{30}^+ + \delta i_3)}, \; \delta i_k = \frac{i_{k0}\pi^2}{2} \frac{S_k \tau_k}{h} \eta_k \mathrm{sh}\eta_k \sum_{n=1}^{\infty} \mu_{nk} n^2, \quad (14)$$

$$\beta_2 i_1 = \frac{i_{20} + \delta i_2}{1 + a_2(i_{20}^+ + \delta i_2)}, \quad \beta_3 i_3 = \frac{i_{30} + \delta i_3}{1 + a_3(i_{30}^+ + \delta i_3)}, \quad \xi_k = \exp\left\{(-1)^{k+1} \frac{eV_k}{K_B T}\right\}.$$

Здесь V_k – напряжение k-ого перехода, K_B – постоянная Больцмана, J_k^{in} – плотность тока, обусловленная внутренними процессами перехода (рекомбинация, тепловая генерация и т.д.), a_k – постоянные с обратным значением тока, обусловленного движением носителей в области сильного поля перехода с некоторой средней дрейфовой скоростью [6,7]. При получении параметрической вольт-амперной характеристики рассматриваемой биполярной структуры (12) также учитывалось, что токопрохождение через обратносмещенный переход меняет больцмановское распределение у его границ [6,7]:

$$Y_k(d_k) = \overline{Y_k} \exp\left(-\frac{eV_k}{K_B T}\right) + a_k(d_k)\overline{Y_k} J_k(d_k);$$

$$Y_{k+1}(l_{k+1}) = \overline{Y_{k+1}} \exp\left(-\frac{eV_k}{K_B T}\right) + a_k(l_{k+1})\overline{Y_{k+1}} J_k(l_{k+1}).$$

Из выражений (12)-(14) и их сравнений с аналогичными формулами (9)-(10) работы [5] вытекает, что влияние поверхностной рекомбинации на электрофизические коэффициенты структуры не связано с освещением. Это естественно, так как эти коэффициенты являются внутренними характеристиками среды. С другой стороны, значение фототока J_F медленно убывает с ростом поверхностной рекомбинации, что связано с уменьшением эффективного времени жизни, а, следовательно, и диффузионной длины пробега неосновных носителей в базовых областях. Однако влияние фототока на вольт-амперную характеристику биполярных структур может оказаться значительным по другой причине: в выражениях характерных токов и напряжений (срыва, инверсии знака напряжения обратносмещенных переходов и т.д.) J_F входит совместно с коэффициентами, зависящими от β_k и i_k [8], значение которых увеличивается с ростом отношения S/h.

ЛИТЕРАТУРА

1. **К.Зеегер**. Физика полупроводников. М., Мир, 1977.
2. **Т.Мосс, Г.Баррел, Б.Эллис**. Полупроводниковая оптоэлектроника. М., Мир, 1976.
3. **С.М.Рывкин**. Фотоэлектрические явления в полупроводниках. М., Физматгиз, 1963.
4. **Г.С.Караян, А.А.Макарян**. Изв. НАН Армении, Физика, **34**, 231 (1999).
5. **Г.С.Караян**. ФТП, **19**, 1334 (1985).
6. **Э.Конуэлл**. Кинетические свойства полупроводников в сильных электрических полях. М., Мир, 1970.
7. **Г.С.Караян**. Полупроводниковые гетероструктуры и фотопреобразователи солнечной энергии. Сб. ст. под ред. Г.М.Авакьянца, Ереван, 1982, с.39.
8. **Г.С.Караян, А.А.Джереджян, Р.С.Асатрян**. Изв. АН Арм.ССР, Физика, **20**, 85 (1985).

ԵՐԿԲԵՎԵՌ ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴՉԱՅԻՆ ԿԱՌՈՒՑՎԱԾՔՆԵՐԻ ՖՈՏՈՀԱՂՈՐԴԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆԸ ՄԱԿԵՐԵՎՈՒԹԱՅԻՆ ՌԵԿՈՄԲԻՆԱՑԻԱՅԻ ԱՌԿԱՅՈՒԹՅԱՆ ԴԵՊՔՈՒՄ

Ռ. Ս. ԱՍԱՏՐՅԱՆ, Հ. Ս. ԿԱՐԱՅԱՆ, Ա. Հ. ՄԱԿԱՐՅԱՆ

Ուսումնասիրված է կիսահաղորդչային անհամասեռ կառուցվածքների բազային տիրույթներում ոչ հիմնական լիցքակիրների կոորդինատային բաշխման փոփոխությունը՝ հաշվի առնելով մակերևութային ռեկոմբինացիան և արտաքին օպտիկական ճառագայթումը: Ցույց է տրված, որ մակերևութային ռեկոմբինացիայի ազդեցությունը կառուցվածքի էլեկտրաֆիզիկական պարամետրերի վրա կախված չէ արտաքին ճառագայթումից:

PHOTOCONDUCTIVITY OF BIPOLAR SEMICONDUCTOR STRUCTURES WITH ACCOUNT OF SURFACE RECOMBINATION

R. S. ASATRYAN, H. S. KARAYAN, A. H. MAKARYAN

We studied the minority charge carriers coordinate distribution change in basic domains of semiconductor inhomogeneous structures with account of surface recombination and optical radiation. It is shown that the surface recombination influence on the electrophysical parameters of structures is not connected with external radiation.

Известия НАН Армении, Физика, т.34, №5, с.314-317 (1999)

УДК 548.733

ЭКРАН-ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЬ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗОБРАЖЕНИЯ С ВЫСОКОЙ РАЗРЕШАЮЩЕЙ СПОСОБНОСТЬЮ И БОЛЬШОЙ СВЕТОСИЛОЙ

К.Т. АВЕТЯН, М.М. АРАКЕЛЯН, С.А. АНЧАРАКЯН,
А.Г. ПАТВАКАНЯН, А.С. СААКЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 6 мая 1998 г.)

Разработан экран-преобразователь рентгеновского изображения в оптическое с высоким пространственным разрешением и большой эффективностью поглощения и преобразования рентгеновского излучения.

В прямых методах рентгенодифракционных топографических исследований изображение структурных несовершенств кристаллов преобразуется в видеосигнал в передающей телевизионной трубке (видикон) с проводящим слоем, чувствительным к рентгеновскому диапазону излучения. Однако, по ряду причин, чувствительность таких видиконов низка, и они могут работать при очень больших интенсивностях рентгеновского излучения [1,2]. Как известно, видиконы с большой чувствительностью существуют для оптических диапазонов излучения. Для их использования в топографических исследованиях требуется промежуточное звено – экран-преобразователь рентгеновского изображения дефектов в видимое изображение. Однако основные требования, предъявляемые к экрану-преобразователю: большая эффективность поглощения и преобразования рентгеновского излучения и высокое пространственное разрешение деталей изображения являются конкурентными факторами. Расчеты показывают, что для однородного прозрачного (для оптического диапазона) слоя люминофора (с учетом условий Рэлея) минимальное расстояние между двумя светящимися точками, изображения которых разрешаются, $\Lambda \approx 2z_0$ (z_0 – толщина слоя люминофора). При требовании $\Lambda \approx 10$ мкм, толщина слоя $z_0 \approx 5$ мкм не обеспечивает достаточную эффективность поглощения рентгеновского излучения. Толщина реального слоя еще меньше. Например, согласно приведенным в [3] экспериментальными данным, $\Lambda \approx (5-6)\ z_0$.

Нами осуществлен экран-преобразователь, который обеспечивает требуемое пространственное разрешение при намного больших толщинах слоя. При этом обеспечивается и большая эффективность преобразования и, следовательно, светосила. Одновременное увеличение двух конкурентных факторов достигается сочетанием плотного однородного слоя люминофора с волоконнооптическим диском (ВОД). При таком сочетании на выходе ВОД-а изображение светящейся точки формируется излучением внутри угла $\Omega = \pi(n_c^2 - n_{ob}{}^2)/n_l^2$, ($n_c$ и $n_{ob.}$ – показатели преломления световедущей жилы и оболочки, n_l – показатель преломления слоя люминофора). Излучение вне этого угла в ВОД не проникает, поскольку не выполняется условие полного внутреннего отражения на границе световедущей жилы и оболочки. Этим условием и определяются предельный угол падения на границе люминофор-ВОД $\sin\gamma = \sqrt{n^2{}_c - n_{ob}{}^2}\,/\,n_l$ и минимальное разрешаемое расстояние $\Lambda = z_0\sqrt{n_c{}^2 - n_{ob}{}^2}\,/\,n_l$. Поскольку световой поток, входящий в одну из световедущих жил, после многократного отражения на выходе будет распределен равномерно по сечению жилы, то распределение потока на выходе будет дискретным. В нашем случае это существенно, т.к. минимальное разрешаемое расстояние порядка диаметра жилы. Отметим еще одну особенность сочетания слоя люминофора с ВОД. Легко убедиться, что при любом расстоянии $z \le z_0 = \Lambda n_l / \sqrt{n_c{}^2 - n_{ob}{}^2}$ светящейся точки от поверхности ВОД-а распределение светового потока на выходе остается неизменным, поскольку число жил, участвующих в формировании изображения, и поток в каждой из них тот же самый. Разрешающая способность ВОД-а определяется диаметром d жил и равна половине числа жил на единице длины [4], а минимально разрешаемое растояние $\Lambda \approx 2\,d$. Таким образом, толщина слоя люминофора, обеспечивающая максимальное разрешение, $z_0 = 2dn_l / \sqrt{n_0{}^2 - n_{ob}{}^2}$.

Светосила сочетания слой люминофора – ВОД определяется потоком света, проникающего в ВОД, и зависит от параметров люминофора: коэффициентов поглощения рентгеновского и оптического излучений μ_p, μ_0, коэффициента преобразования η, толщины слоя z и параметров ВОД-а n_c, n_{ob}. Для выбора параметров, обеспечивающих максимальную светосилу (при заданной разрешающей способности), необходимо аналитическое выражение функции $\Phi(\eta, \mu_p, \mu_0, z, n_c, n_{ob}, n_l)$ – потока света на выходе ВОД-а.

При нормальном падении на слой толщиной z_0 узкого параллельного пучка рентгеновского излучения в слое толщиной dz на глубине $z_0 - z$ (точка $z = 0$ выбрана на выходе слоя) поглощенное изучение будет $dI(z) = I_0\mu_p \exp[-(z_0 - z)\mu_p]dz$ (I_0 – интенсивность падающего излучения). Поток оптического излучения, возникший в этом слое и приходящийся на телесный угол Ω, на выходе слоя будет

$$d\Phi = I_0 \mu\,\eta \frac{\Omega}{4} \exp[-(z_0 - z)\mu_p] \exp(-\mu_0 z)dz .$$

Интегральный поток света, проникающий в ВОД, будет

$$\Phi = I_0 \eta \frac{n_c{}^2 - n_{ob}{}^2}{4n_l} \frac{\mu_p}{\mu_p - \mu_0} [\exp(-\mu_0 z) - \exp(-\mu_p z)]$$

(в дальнейшем z – толщина слоя). Введем функцию

$$F(\mu_p,\mu_0,z)=\frac{\mu_p}{\mu_p-\mu_0}[\exp(-\mu_0 z)-\exp(-\mu_p z)],$$

максимальное значение которой (равное единице) достигается при полном поглощении рентгеновского излучения ($\mu_p z >> 1$) и отсутствии поглощения оптического излучения ($\mu_0 = 0$).

Нецелесообразность прозрачных слоев обсудим ниже. Рассмотрим слои с $\mu_0 \neq 0$. Функцию $F(\mu_p,\mu_0,z)$ представим в виде

$$F(\mu,\Delta\mu,z)=\mu z\exp(-\mu z)\frac{\mathrm{sh}\Delta\mu z}{\Delta\mu z}(1+\frac{\Delta\mu}{\mu}),$$

обозначив $\mu_p+\mu_0=2\mu$, $\mu_p-\mu_0=2\Delta\mu$.

Множитель $\mu z\exp(-\mu z)$ имеет максимум при $\mu z=1$. Множитель $\mathrm{sh}\Delta\mu z/\Delta\mu z=1$ при $\Delta\mu z<<1$ и немного больше единицы при $\Delta\mu z\approx 1$ (заметим, что $\Delta\mu\leq\mu$). Таким образом, при $\mu z\approx 1$ значении функции F($\mu,\Delta\mu,z$) определяется множителем $(1+\Delta\mu/\mu)$, который может меняться от 1 до 2.

Выбор параметров слоя люминофора ($\eta, n_l, \mu_p, \mu_0 z$) и волоконно-оптического диска (n_c, n_{ob}, d) диктуется условиями максимума светосилы при заданном значении разрешающей способности. Мы уже установили, что при любой толщине слоя $z\leq 2dn_l/\sqrt{n_c^2-n_{ob}^2}$ разрешающая способность одна и та же. Для ВОД-а с апертурой $A=\sqrt{n_c^2-n_{ob}^2}=0{,}54$, $d=8$ мкм, $n_1=2{,}2$ $z\approx 60$ мкм. При таких толщинах почти у всех массивных прозрачных люминофоров $\mu_p z<1$ (для излучения MoK_α $\lambda=0{,}71$ Å). Кроме того, весьма существен тот факт, что для массивных люминофоров значение коэффициента преобразования η весьма низко (1-2%). Значение η намного больше для порошкообразных активированных люминофоров с размерами зерен 3-5 мкм (20-22%) [5]. Мы выбрали порошкообразный люминофор Gd_2O_2S, активированный тербием (Tb). Всем традиционным способам осаждения слоя из порошка присущ весьма нежелательный недостаток. При осаждении слоя в нем неизбежно возникает множество пор с размерами, в несколько раз превышающими размеры зерен. Эти поры являются как бы слепыми областями экрана, и на изображение накладывается структура экрана. Это особенно заметно при малых толщинах. Кроме того, при рыхлом слое приходится увеличивать толщину слоя для обеспечения необходимого поглощения рентгеновского излучения.

Нами разработана методика осаждения экрана с однородностью и плотностью, достаточной для наших целей [6]. Суть метода заключается в следующем. С порошком люминофора смешивается связывающее жидкое, полимеризующее вещество в соотношении 1:10 (объемном). Смесь наносится на тщательно очищенную поверхность ВОД-а. Далее смесь подвергается вибрации с частотой 50-100 Гц. При этом плотность смеси существенно увеличивается, и густая паста распространяется на поверхности ВОД-а. Критерием уплотнения смеси является выход поверхность излишней жидкости. Толщина, при которой $\mu_p z = 1$, дост гается механической полировкой после затвердевания слоя. Измерени показывают, что толщина слоя, изготовленного из порошка Gd_2O_2S при котором $\mu_p z = 1$, $z \approx 50$ мкм (для MoK_α). Максимальная прозрач ность получилась бы при значении показателя преломления связующег вещества, равного показателю преломления зерен люминофора (дл Gd_2O_2S $n_\ell = 2{,}2$). Нам не удалось найти связующее вещество с таким показателем преломления. Подходящей считали эпоксидную смолу ОП 1-0,28. Кроме того, не велик выбор ВОД-а. Несмотря на это, экран-преобразователь вполне удовлетворяет требованиям визуализации рентгенодифракционных топографических изображений структурных несовершенств кристаллов при сочетании с супервидиконом ЛИ-702.

Разрешающая способность измерялась веером вольфрамовых нитей диаметром 10 мкм. при толщинах слоя 50-60 мкм разрешающая способность составляет 30-35 пар линий на мм, что совпадает с расчетным значением. Плотность слоя $\rho_{сл} \approx (0{,}6\text{-}0{,}7)\ \rho_n$ ($\rho_n = 7{,}2$ г/см^3 для Gd_2O_2S).

Осаждение люминофора на ВОД удобно и тем, что оптическое изображение на выходе можно почти без потерь интенсивности и без искажений перевести на фотокатод супервидикона непосредственным оптическим контактом с входным окном супервидикона (оно тоже волоконнооптическое). При любом другом способе перевода изображения на фотокатод большие потери и искажения неизбежны.

Эксперименты были проведены с экранами, осажденными на ВОД, с апертурой А = 0,54. Поскольку светосила пропорциональна A^2, а разрешающая способность 1/А, то при замене ВОД с А=1 ожидалось увеличение светосилы в $1/(0{,}54)^2$ раза и уменьшение разрешающей способности в 0,54 раза. Однако при такой замене уменьшается и толщина слоя, при которой разрешающая способность максимальна, и нарушается условие $\mu z = 1$. Таким образом, для начальных условий $\lambda = 0{,}71$ Å, разрешающая способность 30 пар линий на мм оптимальными являются ВОД с апертурой А =0,54 и люминофор Gd_2O_2S с толщиной z~50-60 мкм.

ЛИТЕРАТУРА

1. **J.Chikawa, I.Fujimoto**. Appl. Phys. Letters, **13**, 387 (1969).
2. **A.N.Chester, F.B. Koch**. Advances in X-ray Analysis, **12**, 165 (1969).
3. **И.И.Лобанова, М.В.Провоторов, С.С.Галактионов**. А.С.СССР №1222129, 1984.
4. **В.Б.Вейнберг, Д.К.Саттаров**. Оптика световодов. Ленинград, Машиностроение, 1977.
5. **А.М.Гурвич**. Рентгенолюминофоры и рентгеновские экраны. М., Атомиздат, 1976.
6. **К.Т.Аветян, Т.К.Мелконян, А.П.Джотян, С.А.Анчаракян, А.Г.Патваканян**. А.С. СССР №1697548, 1991.

SCREEN-CONVERTER OF X-RAY IMAGES WITH HIGH RESOLUTION AND APERTURE

K. T. AVETYAN, M. M. ARAKELYAN, S. H. ANCHARAKYAN,
A. G. PATVAKANYAN, A. S. SAHAKYAN

A screen-converter of X-ray images to optical ones with high space resolution and high degree of effective absorption and transformation of X-rays is developed.

К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

В журнале печатаются статьи и краткие сообщения авторов по всем разделам современной физики на русском и армянском языках. Редакция просит авторов при направлении статей придерживаться следующих правил.

1. Статьи, поступающие в редакцию, должны иметь направление от учреждения, в котором выполнена работа, а также акт экспертизы. Название учреждения приводится перед текстом статьи после фамилий авторов.

2. Объем каждой статьи не должен превышать 10 страниц, а краткого сообщения −3 страниц текста и 2 рисунков. Работы необходимо представлять в двух экземплярах, отпечатанных на машинке или на принтере через 2 интервала.

3. Тексту каждой статьи предшествует индекс УДК, проставленный в левом верхнем углу. Непосредственно перед текстом статьи или краткого сообщения после заглавия помещается аннотация. К работам, представленным на русском языке, должны быть приложены резюме на армянском и английском языках.

4. Следует ограничиваться минимальным количеством рисунков и фотографий. Их размеры не должны превышать 10×15 см. Они должны быть представлены в двух экземплярах, на обороте рисунков необходимо указать фамилии авторов, название статьи и номер рисунка. Подписи к рисункам должны быть собраны на отдельном листе.

5. Формулы следует вписывать четко и крупно, их нумерация должна быть сплошной по всей статье. Греческие буквы надо подчеркивать снизу красной чертой. Векторы не следует помечать стрелкой сверху, а следует подчеркивать снизу синей чертой. В тех случаях, когда заглавные и строчные буквы одинаковы и отличаются только размерами, необходимо в формулах заглавные буквы подчеркивать снизу двумя черточками, а строчные −двумя черточками сверху.

6. Цитируемая литература должна даваться общим списком в конце статьи. В тексте ссылка приводится цифрой в прямых скобках в порядке упоминания в статье. В списке литературы необходимо указать: для книг −инициалы и фамилию автора, название книги, место издания, издательство, год издания; для периодических изданий −инициалы и фамилию автора, название журнала, том, номер выпуска, первую страницу и год издания.

7. Статья должна быть подписана всеми авторами. Необходимо также приложить точный адрес, фамилию, имя, отчество автора и адрес учреждения, где выполнена работа.

8. В случае возвращения автору его рукописи для доработки датой поступления считается день получения редакцией окончательного варианта статьи.

9. Редакция посылает автору одну корректуру. Корректура с подписью автора и датой ее подписания должна быть выслана в редакцию в течение суток с момента ее получения.

Статьи, в которых не соблюдены указанные правила, к рассмотрению приниматься не будут.

Адрес редакции "Известий НАН Армении, Физика": Республика Армения, 375019, Ереван, пр. Маршала Баграмяна, 24-г. Тел. 56-80-67.

ԲՈՎԱՆԴԱԿՈՒԹՅՈՒՆ

CONTENTS

СОДЕРЖАНИЕ

Отпечатано на копи-принтере Rex Rotary CP1280
фирмы RICOH

Заказ №37. Тираж 200.
Сдано в набор 15.10.99. Подписано к печати 23.10.99.
Печ. л. 4. Бумага KYM-ultra. Цена договорная.
Издательство "Гитутюн" НАН РА. Компьютерная редакционно-издательская служба. 375019, Ереван, пр. Маршала Баграмяна, 24-г.