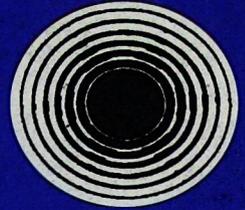


ISSN 0002-3035

ՓԻՅԻԿԱ · ՖԻԶԻԿԱ · PHYSICS



ИЗВЕСТИЯ
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК АРМЕНИИ

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ
ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ԳԻՏՈՒՂԱՅԻՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ

PROCEEDINGS
OF NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF ARMENIA

37, N1, 2002

ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ՀԱՆՐԱՊԵՏՈՒԹՅԱՆ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱ
НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК РЕСПУБЛИКИ АРМЕНИЯ

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ ИЗВЕСТИЯ
ՖԻԶԻԿԱ ФИЗИКА

ՀԱՏՈՐ ԿՈՄ

37

№ 1



ՀՀ ԳԱՍ «ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆ» ՀՐԱՏԱՐԱԿՉՈՒԹՅՈՒՆ ԻԶԴԱՏԵԼՅՑՏՎՈ «ԿԻՄԻՍԻՍ» ՆԱՆ ԲԱ
ԵՐԵՎԱՆ ԵՐԵՎԱՆ

2002

ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ԳՆԱԿԱԿԱՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱ
ՖԻԶԻԿԱԿԱՆ ԻՆՏԵՐՆԱԿԱՆ ԳՐԱԿԱՆՈՒԹՅԱՆ ԿԵՆՏՐՈՆ

ՏԵՐԻՄԻՆԱԿԱՆ ԳՐԱԿԱՆՈՒԹՅԱՆ
ՓՈՅՈՒՆ

ԸՆԴՀԱՆՈՒՄ ԿԵՆՏՐՈՆ

37

1991

© Национальная Академия наук Армении
Известия НАН Армении, Физика

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

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

В. М. Арутюнян, главный редактор
Э. Г. Шароян, зам. главного редактора
А. А. Ахумян
Г. А. Вартапетян
Э. М. Казарян
А. О. Меликян
А. Р. Мкртчян
Д. Г. Саркисян
Ю. С. Чилингарян
А. А. Мирзаханян, ответственный секретарь

ԽՄԻԱԳՐԱՎԱՆ ԿՈՒԵԳԻԱ

Վ. Մ. Հարությունյան, գլխավոր խմբագիր
Է. Գ. Շառոյան, գլխավոր խմբագրի տեղակալ
Ա. Ա. Հախումյան
Հ. Հ. Վարդապետյան
Է. Մ. Ղազարյան
Ա. Հ. Մելիքյան
Ա. Ռ. Մկրտչյան
Գ. Հ. Սարգսյան
Յու. Ս. Չիլինգարյան
Ա. Ա. Միրզախանյան, պատասխանատու քարտուղար

EDITORIAL BOARD

V. M. Aroutiounian, editor-in-chief
E. G. Sharoyan, associate editor
A. A. Hakhumyan
H. H. Vartapetian
E. M. Ghazaryan
A. O. Melikyan
A. R. Mkrtchyan
D. H. Sarkisyan
Yu. S. Chilingaryan
A. A. Mirzakhanyan, executive secretary

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

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

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

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.

КВАНТОВОЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ СВЯЗИ

Т.К. МЕЛИК-БАРХУДАРОВ

АОЗТ "Лазерная техника", Ереван

(Поступила в редакцию 18 июля 2001 г.)

В рамках квантовой электродинамики найдена пропускная способность канала связи, в котором источник информации моделируется классическим током, а в качестве детектора используется металлический слой, в котором падающее излучение возбуждает ток.

Основы современной теории связи были заложены Шенноном [1], предложившим простую математическую модель связи, в которой процесс связи рассматривался как стохастический по своей природе. Шеннон связал количество информации, содержащееся в сообщении, с его вероятностью. Другими словами, чем больше неопределенность, снимаемая сообщением, тем больше информация, получаемая нами при его приеме. Вероятностный подход Шеннона оказался исключительно плодотворным и привел к созданию отдельного раздела прикладной теории вероятностей – теории информации, нашедшей применение в многочисленных областях человеческого знания. Вместе с тем очевидно, что только методами теории вероятностей проблему передачи информации невозможно решить. Мы имеем дело прежде всего с задачей распространения излучения, которая должна рассматриваться в рамках квантовой электродинамики. В частности, только квантовая теория позволяет последовательно описать шумы, ограничивающие скорость передачи информации.

Сформулируем задачу связи. Предположим, что задан функционал $\rho[I(x)]$, описывающий распределение некоторой величины $I(x)$, характеризующей источник информации. Тогда с помощью $\rho[I(x)]$ и функционала условного распределения выходного сигнала при заданном входном $\rho[j(x)|I(x)]$, можно найти функционал совместного распределения величин $j(x)$ и $I(x)$:

$$\rho[j(x), I(x)] = \rho[I(x)]\rho[j(x)|I(x)]. \quad (1)$$

Суммируя по всем конфигурациям $I(x)$, получим функционал распределения $j(x)$

$$\rho[j(x)] = \int \rho[I(x)] \rho[j(x)|I(x)] DI(x). \quad (2)$$

Следуя Шеннону, в качестве меры информации, содержащейся в сигнале $j(x)$, относительно сигнала $I(x)$ используется величина [1]

$$I = \int \rho[j(x), I(x)] \ln \frac{\rho[j(x), I(x)]}{\rho[j(x)] \rho[I(x)]} Dj(x) DI(x), \quad (3)$$

характеризующая статистическую зависимость $j(x)$ и $I(x)$. В случае статистически независимых сигналов $j(x)$ и $I(x)$, т. е. когда ни один из сигналов не содержит информацию о другом, величина I равна нулю. В случае, когда входной сигнал состоит из двух независимых сигналов, т.е. $I(x) = I_1(x) + I_2(x)$, информация в выходном сигнале равна сумме информации, полученных от каждого входного сигнала. Информация I может быть переписана следующим образом:

$$I = H_x - H_{x|r}, \quad (4)$$

где H_x и $H_{x|r}$ определены соотношениями

$$H_x = - \int \rho[I(x)] \ln \rho[I(x)] DI(x), \quad (5)$$

$$H_{x|r} = - \int \rho[I(x)|j(x)] \ln \rho[I(x)|j(x)] Dj(x) DI(x). \quad (6)$$

В свою очередь, $\rho[I(x)|j(x)]$ следует из соотношения

$$\rho[I(x)] \rho[j(x)|I(x)] = \rho[j(x)] \rho[I(x)|j(x)]. \quad (7)$$

Средняя полученная информация I может быть интерпретирована как разность между переданной информацией H_x и информацией, потерянной в канале, $H_{x|r}$. В качестве начального распределения $\rho[I(x)]$ выбирается гауссово с заданной функцией корреляции $(I^2)(x-x')$. В соответствии с шенноновской теорией такой источник обеспечивает максимальную скорость производства информации при заданной плотности интенсивности сигнала. Нам же остается методами квантовой теории поля вычислить величину $\rho[j(x)|I(x)]$.

Мы исходим из выражения для производящего функционала системы [2]

$$e^{-iW/\hbar} = \langle T e^{\frac{i}{\hbar} \int L_{\text{int}} dt} \rangle, \quad (8)$$

где L_{int} – лагранжиан максвелловского и дираковского полей, взаимодействующих друг с другом и с заданными внешними источниками:

$$L_{\text{int}} = -\frac{1}{c^2} \int (j^\lambda A_\lambda + I^\lambda A_\lambda + j^\lambda A_\lambda) d^4x, \quad (9)$$

где A_λ – векторный потенциал, j^λ – дираковский ток, $\bar{\psi}$ – дираковски сопряженная ψ . Интегрирование по времени проводится сначала от $t_{initial}$ до t_{final} и затем в обратном порядке от t_{final} до $t_{initial}$. Другими словами, контур интегрирования C состоит из двух линий C^+ и C^- , примыкающих к временной оси. Значения источников предполагаются различными на верхнем и нижнем контурах, так что, например, $A^{(+)} = A(t^+)$, $A^{(-)} = A(t^-)$, где t^+ и t^- – значения временной переменной на C^+ и C^- . Символ T означает операцию хронологического упорядочения полевых операторов вдоль контура C . Усреднение в (8) производится по начальному состоянию системы, в качестве которого выбирается каноническое распределение. Производящий функционал зависит, вообще говоря, от двойной совокупности источников, скажем $A_\lambda^{(\pm)}$, а в качестве его независимых переменных выбираются их симметричные и антисимметричные комбинации, а именно, $A_s = 1/2(A^{(-)} + A^{(+)})$ и $A_a = A^{(-)} - A^{(+)}$. Дифференцируя W по A_s и A_a и полагая затем антисимметричные комбинации источников равными нулю, получим

$$c^2 \left(\frac{\delta W}{\delta A_\alpha^\lambda} \right)_{A_a \rightarrow 0} = \langle j_\lambda \rangle, \quad (10)$$

$$c \left(\frac{\delta^2 W}{\delta A_\alpha^\lambda(x_1) \delta A_\alpha^\mu(x_2)} \right)_{A_a \rightarrow 0} = \frac{1}{2} \Pi_{\lambda,\mu}^K(x_1, x_2), \quad (11)$$

где

$$i\hbar c^3 \Pi_{\lambda,\mu}^K(x_1, x_2) = \langle j_\lambda(x_1) j_\mu(x_2) + j_\mu(x_2) j_\lambda(x_1) \rangle - 2 \langle j_\lambda(x_1) \rangle \langle j_\mu(x_2) \rangle. \quad (12)$$

Поскольку гейзенберговские операторы плотности тока, относящиеся к различным пространственно-временным точкам, не коммутируют между собой, квантовые функции корреляции определяются как средние от симметричных комбинаций произведений операторов. Непосредственное вычисление производящего функционала может быть произведено разложением экспоненты в (8) с последующим использованием теоремы Вика для среднего по каноническому распределению от произведения произвольного числа полевых операторов. Ряд теории возмущений для производящего функционала имеет тот же вид, что и соответствующий ряд в задаче рассеяния квантовой теории поля с заменой фейнмановских пропагаторов величинами

$$G = \begin{pmatrix} 0 & G^A \\ G^R & G^K \end{pmatrix}, \quad (13)$$

где G^K , G^R и G^A – кинетическая, запаздывающая и опережающая функции Грина свободного дираковского поля, определяемые соотно-

шениями

$$ihcG^K(x_1, x_2) = \langle [\psi(x_1), \bar{\psi}(x_2)]_- \rangle, \quad (14)$$

$$ihcG^R(x_1, x_2) = \Theta(t_1 - t_2) \langle [\psi(x_1), \bar{\psi}(x_2)]_+ \rangle, \quad (15)$$

$$ihcG^R(x_1, x_2) = -\Theta(t_2 - t_1) \langle [\psi(x_1), \bar{\psi}(x_2)]_+ \rangle, \quad (16)$$

и

$$D = \begin{pmatrix} 0 & D^A \\ D^R & D^K \end{pmatrix}, \quad (17)$$

где функции Грина свободного максвелловского поля определяются аналогичными соотношениями с заменой коммутаторов антикоммутаторами и наоборот. Переход от операторного к формализму функционального интегрирования совершается с помощью процедуры, изложенной в [3]. В итоге выражение для производящего функционала через фейнмановский интеграл по конфигурациям полей представляется в виде

$$e^{-iW/\hbar} = \int \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right) \mathcal{D}A \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\bar{\psi} \left(\int \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_0\right) \mathcal{D}A \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\bar{\psi} \right)^{-1}, \quad (18)$$

где S – действие взаимодействующей системы, а S_0 – действие свободных полей. Мы приходим к функциональной формулировке техники Келдыша [4]. Интегрируя по дираковскому полю, получим с точностью до квадратичных по максвелловскому полю членов следующее выражение для производящего функционала:

$$e^{-iW/\hbar} = \int e^{i[A_\lambda \frac{(D^{-1})^{\mu\nu}}{2} A_\mu - \frac{1}{c} J^\lambda A_\lambda - \frac{1}{2}(A+\Lambda)P(A+\Lambda)]} \mathcal{D}A \left(\int e^{\frac{i}{2ch} A_\lambda (D^{-1})^{\mu\nu} A_\mu} \mathcal{D}A \right)^{-1}, \quad (19)$$

где

$$P = \begin{pmatrix} P^K & P^R \\ P^A & 0 \end{pmatrix},$$

$$P_{\lambda\mu}{}^K(x-x') = -\frac{ie^2\hbar c}{2} \text{tr} \left(\begin{aligned} & \gamma_\lambda G^A(x-x') \gamma_\mu G^R(x'-x) + \gamma_\lambda G^R(x-x') \gamma_\mu G^A(x'-x) + \\ & + \gamma_\lambda G^K(x-x') \gamma_\mu G^K(x'-x) \end{aligned} \right), \quad (20)$$

$$P_{\lambda\mu}{}^R(x-x') = -\frac{ie^2\hbar c}{2} \text{tr} \left(\gamma_\lambda G^R(x-x') \gamma_\mu G^K(x'-x) + \gamma_\lambda G^K(x-x') \gamma_\mu G^A(x'-x) \right), \quad (21)$$

$$P_{\lambda\mu}{}^A(x-x') = -\frac{ie^2\hbar c}{2} \text{tr} \left(\gamma_\lambda G^A(x-x') \gamma_\mu G^K(x'-x) + \gamma_\lambda G^K(x-x') \gamma_\mu G^R(x'-x) \right), \quad (22)$$

γ_μ – матрицы Дирака, а G^K , G^R и G^A – функции Грина дираковского

поля, определяемые формулами (14-16). Поскольку интеграл (19) гауссов, вычисление его проводится немедленно и мы получаем для производящего функционала системы W

$$W[A] = \frac{1}{2c} \left[A \Pi A + \frac{1}{c} (A \Pi D I + I D \Pi A) \right], \quad (23)$$

где Π – собственная энергия максвелловского поля, определяемая из уравнения

$$\Pi = P + P D P, \quad (24)$$

В свою очередь, гриновские функции взаимодействующего максвелловского поля D удовлетворяют уравнению Дайсона

$$D^{-1} = D^{-1} - P. \quad (25)$$

Переписывая (23) в компонентах, получим для производящего функционала следующее выражение:

$$W = \frac{1}{2c} \left[\frac{1}{4} A_a \Pi^K A_a + \frac{1}{c} \langle j \rangle A_a \right], \quad (26)$$

где среднее значение плотности тока

$$\langle j \rangle = \Pi^R (c A_s + D^R I). \quad (27)$$

Как мы отметили ранее, дифференцирование производящего функционала A_a в пределе $A_a \rightarrow 0$ дает квантовые корреляционные функции произвольного порядка. Другими словами, производящий функционал W может быть представлен в форме

$$e^{-iW/\hbar} = \int e^{-\frac{i}{c^2 \hbar} \int j^a(x) A_a(x) d^4x} \rho[j(x)|I(x)] D j(x), \quad (28)$$

где $\rho[j(x)|I(x)]$ может рассматриваться как условный функционал распределения плотности тока на выходе системы при входной плотности тока. Так как $W[0] = 0$, то функционал $\rho[j(x)|I(x)]$ нормализован, как и должно быть, на единицу. Корреляционные функции n -го порядка определяются интегралом

$$\int j(x_1) j(x_2) \dots j(x_n) \rho[j(x)|I(x)] D j(x). \quad (29)$$

Очевидно, условный функционал распределения может быть получен посредством фурье-преобразования $e^{-iW/\hbar}$, т. е.

$$\rho[j(x)|I(x)] = \int e^{-\frac{i}{c^2 \hbar} \int j^a(x) A_a(x) d^4x} e^{-iW/\hbar} D A_a(x). \quad (30)$$

Подставляя W из (26), мы получим после интегрирования

$$\rho[j(x)|I(x)] = \exp\left[-\frac{1}{2} \int dx^4 dx'^4 (j(x) - \langle j(x) \rangle) (f^2)^{-1} (x-x') (j(x') - \langle j(x') \rangle)\right], \quad (31)$$

$$(f^2)(x-x') = \frac{i\hbar c^3}{2} \Pi^K(x-x'). \quad (32)$$

Как уже упоминалось, мы выбираем функционал распределения плотности тока на входе системы $\rho[I(x)]$ в виде

$$\rho[I(x)] = \exp\left[-\frac{1}{2} \int I(x) (I^2)^{-1} (x-x') I(x') dx^4 dx'^4\right] \quad (33)$$

с заданной функцией корреляции $(I^2)(x-x')$. В итоге мы получаем с помощью соотношения (2) следующее выражение для функционала распределения плотности тока на выходе системы:

$$\rho[j(x)] = \exp\left[-\frac{1}{2} \int j(x) (j^2)^{-1} (x-x') j(x') dx^4 dx'^4\right], \quad (34)$$

где

$$(j^2) = (f^2) + (j')^2, \quad (35)$$

а усредненный по начальному распределению $\rho[I(x)]$ квадрат плотности тока на выходе системы

$$(j')^2 = \Pi^R D^R (I^2) D^A \Pi^A. \quad (36)$$

С помощью формул (24), (26) и (27) мы получим для информации, переданной по каналу связи, следующее выражение:

$$I = \frac{1}{2} \sum_q \ln \left(1 + \frac{(j_q)^2}{(f^2)_q} \right), \quad (37)$$

где $(f^2)_q$ и j_q – соответствующие Фурье-компоненты $j(x) = \sum_q j_q e^{-iqx}$.

До сих пор, говоря о поле материи, мы называли его дираковским, имея в виду его релятивистский характер. В реальных же коммуникационных системах реализуется нерелятивистский предел. Разлагая действие S в ряд по $1/c$, получим в экспоненте подынтегрального выражения члены, пропорциональные c^2 , которые и выделяют в приближении стационарной фазы нерелятивистские конфигурации электронного поля.

Мы ограничимся случаем простейшей приемной системы, а именно, проводящим слоем, в котором падающее излучение возбуждает

ток, а основным источником шума является рассеяние электронов хаотически расположенными неоднородностями решетки. В такой системе необходимо провести усреднение поляризационного оператора по положениям рассеивающих центров. Техника такого усреднения изложена в работе [5], где была найдена запаздывающая часть поляризационного оператора, определяющая проводимость системы. Для наших целей нам необходима также кинетическая часть. Мы ограничимся также случаем, когда длина волны излучения много больше глубины его проникновения $\delta = c\sqrt{2/\omega\sigma}$.

Выпишем для пропускной способности канала связи $C = I/T$, где T – продолжительность связи, выражение

$$C = \frac{1}{4\pi} \int \ln \left(1 + \frac{(J)_\omega^2}{(f^2)_\omega} \right) d\omega, \quad (38)$$

где $(J)^2$ – усредненный по $\rho[I(x)]$ квадрат выходного тока. Представим соотношение сигнал/шум в виде

$$\frac{(J)_\omega^2}{(f^2)_\omega} = \frac{(I)_\omega^2}{(F^2)_\omega}, \quad (39)$$

где

$$\begin{aligned} (F^2)_\omega = \hbar c^3 \left| 1 + i \frac{\omega}{cs} \coth sd \right|^2 e^{i(s-s^*)} & \left\{ iP^K \left(\frac{\sin(s+s^*)d}{s+s^*} + \frac{\sin(s-s^*)d}{s-s^*} \right) + \right. \\ & \left. + \frac{2c|s|^2}{\omega} [\cos(s-s^*)d - \cos(s+s^*)d] \coth \frac{\hbar\omega}{2kT} \right\}. \end{aligned} \quad (40)$$

При толщине слоя $d \ll \delta$ мы имеем

$$(F^2)_\omega = 4\hbar\omega c^2 \coth \frac{\hbar\omega}{2kT} \left(1 + \frac{c}{\sigma d} \right) \left(1 + \frac{\sigma d}{c} \right)^2. \quad (41)$$

Максимальное значение сигнал/шум имеет место при $d = c/2\sigma$, а соответствующая формула при $d \gg \delta$ имеет вид

$$(F^2)_\omega = \hbar c^2 \sigma \coth \frac{\hbar\omega}{2kT}. \quad (42)$$

Отсюда видно, что при $\hbar\omega \ll kT$ интенсивность шумов возрастает как $1/\omega$, т.е. формула (42) описывает так называемый Фликкер-шум.

ЛИТЕРАТУРА

1. С.Е.Shannon. Bell System Technical Journal, 27, 379 and 623 (1948).
2. Т.К.Melik-Barkhudarov and L.L.Minasian. J. Phys. B, 27, 1257 (1994).

3. П. Рамон. Теория поля. Современный вводный курс. М., Мир, 1984.
4. Л. В. Келдыш. ЖЭТФ, 20, 1018 (1965).
5. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М., Наука, 1965.

ԿԱՊԻ ԲՎԱՆՏԱԷԼԵԿՏՐՈԴԻՆԱՄԻԿԱԿԱՎԱՆ ՏԵՍԻԹՅՈՒՆ

Թ. Կ. ՄԵԼԻԿ-ԲԱՐԽՈՒՐԱՐՈՎ

Քվանտային էլեկտրադինամիկայի շրջանակներում հաշվված է կապի գծի թողունակությունը այն դեպքում, երբ ինֆորմացիայի աղբյուր է հանդիսանում դասական հոսանքը, իսկ ընդունիչն է մետաղական շերտը, որում ընկնող ճառագայթունը գրգռում է հոսանք:

QUANTUM ELECTRODYNAMIC THEORY OF COMMUNICATION

T. K. MELIK-BARKHUDAROV

The transmission capacity of a communication channel with a classical current as a source of information, and a metallic layer as a detector is obtained in the framework of quantum electrodynamics.

УДК 533.922

КИЛЬВАТЕРНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ БЫСТРОЙ ЗАРЯЖЕННОЙ ЧАСТИЦЫ В ПЛАЗМЕ

Э.А. АКОПЯН, Г.Г. МАТЕВОСЯН, Р.А. ГЕВОРКЯН, А.В. ОГАНЕСЯН

Институт радиофизики и электроники НАН Армении

(Поступила в редакцию 24 мая 2001 г.)

Рассмотрена задача о потенциале быстрой заряженной частицы, движущейся в максвелловской плазме. С использованием модельной функции диэлектрической проницаемости максвелловской плазмы найдены аналитические выражения для потенциала в произвольной точке наблюдения. Проведены оценки, показывающие корректность принятого приближения.

В последние десятилетия резко возрос интерес к изучению кильватерных полей и связанных с ними потерь энергии электронными пучками и кластерами тяжелых нерелятивистских заряженных частиц при прохождении их через вещество. Об этом свидетельствует большое количество экспериментальных и теоретических работ, посвященных изучению вышеуказанных явлений (см., например, обзоры [1,2]). Связано это, в первую очередь, с применением результатов этих исследований в таких важных и актуальных проблемах, как осуществление ионного термоядерного синтеза и конструирование принципиально новых ускорителей заряженных частиц, обладающих чрезвычайно высоким темпом ускорения.

В настоящей работе проведен расчет кильватерного потенциала равномерно прямолинейно движущейся в плазме быстрой ($u > v$, u – абсолютная величина скорости частицы, v – тепловая скорость электронов плазмы) нерелятивистской заряженной частицы.

Известно (см., например, [3]), что потенциал электрического поля $\varphi(\mathbf{r}, t)$ такой частицы описывается следующим выражением:

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \frac{4\pi q}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \frac{\exp[i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{u}t)]}{k^2 \varepsilon(k, \mathbf{k}\mathbf{u})}, \quad (1)$$

где \mathbf{r} – радиус-вектор точки наблюдения, q , \mathbf{u} – заряд и скорость пробной частицы, $\varepsilon(k, \omega)$ – продольная диэлектрическая проницаемость плазмы.

В дальнейшем мы будем считать положительно заряженные ионы

плазмы неподвижным нейтрализующим фоном, так что под $\varepsilon(k, \omega)$ будем понимать электронную диэлектрическую проницаемость.

В случае плазмы с максвелловским распределением функция $\varepsilon(k, \omega)$ имеет следующий вид [3]:

$$\varepsilon(k, \omega) = 1 + \frac{1}{k^2 \lambda_D^2} \left[1 - J_+ \left(\frac{\omega}{kv} \right) \right] \equiv 1 + \frac{1}{k^2 \lambda_D^2} [A(\xi) + iB(\xi)], \quad (2)$$

$$A(\xi) = 1 - \operatorname{Re}[J_+(\xi)] = 1 - \xi e^{-\xi^2/2} \int_0^\xi dt e^{t^2/2}, \quad B(\xi) = -\operatorname{Im}[J_+(\xi)] = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \xi e^{-\xi^2/2},$$

где $\xi = \omega / kv$, λ_D - дебаевский радиус.

Хорошо известно, что основной вклад в потерях энергии частицей, а следовательно, и в потенциал, создаваемый ею в плазме, обусловлен волнами, для которых плазма прозрачна. Как показывают численные расчеты (см. рис.1), функция $B(\xi)$ становится достаточно малой ($B(\xi) < 0.016$) уже при значениях аргумента $\xi \geq 3.3$. При этих же значениях аргумента функция $A(\xi)$ с достаточно хорошей точностью (относительная погрешность приближения меньше 4%) описывается ее асимптотическим выражением $A(\xi) \approx -1/\xi^2$ (пунктирная линия на рис.1).

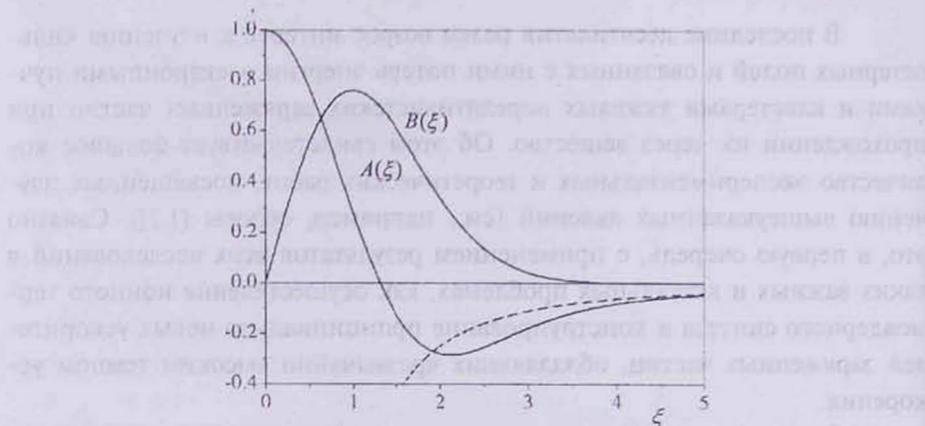


Рис.1. Дисперсионные функции плазмы $A(\xi)$ и $B(\xi)$ (формулы (2)). Пунктирная линия - асимптотическое значение $A(\xi) \approx -1/\xi^2$.

С учетом указанного запишем выражение (1) в следующем виде:

$$\varphi(\mathbf{R}) = \frac{q}{R} + \frac{2q}{\pi \lambda^2 \lambda_D} \int_0^\infty dk \int_{\Delta}^1 dx J_0 \left(\frac{k}{\lambda_D} \rho \sqrt{1-x^2} \right) \times$$

$$\times \left\{ \frac{1}{x^2 k^2 - \frac{1}{\lambda^2}} \cos \left(\frac{k}{\lambda_D} zx \right) + \frac{\pi}{x^2} \delta \left(k^2 - \frac{1}{\lambda^2 x^2} \right) \sin \left(\frac{k}{\lambda_D} zx \right) \right\}, \quad (3)$$

где $J_0(x)$ – функция Бесселя нулевого порядка, $\Delta = 3.3/\lambda < 1$, $\lambda = u/v \gg 1$, $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{ur}$, z , ρ – проекции вектора \mathbf{R} на направление \mathbf{u} и перпендикулярное ему, соответственно. Заметим, что в выражении (3) первый интеграл является четной, а второй – нечетной функцией z .

Дальнейшие вычисления потенциала $\varphi(\mathbf{R})$ приводят к следующим выражениям:

$$1. \text{ Область } \frac{\rho}{|z|} \geq \frac{\Delta}{\sqrt{1-\Delta^2}} = \frac{1}{\Delta_0} \equiv \operatorname{tg} \alpha_0;$$

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{R}) = & \frac{q}{R} - \frac{2q}{\pi\lambda\lambda_D} \left\{ \int_0^{|z|/\rho} \frac{F_1(x) dx}{\sqrt{x^2+1}} \sin \left[\frac{1}{\lambda\lambda_D} (|z| - \rho x) \right] + \right. \\ & \left. + \cos \left(\frac{z}{\lambda\lambda_D} \right) \int_{|z|/\rho}^{\Delta_0} \frac{F_2(x) dx}{\sqrt{x^2+1}} \sin \left(\frac{\rho x}{\lambda\lambda_D} \right) \right\} + \\ & + \frac{q}{\lambda\lambda_D} \left\{ \mathfrak{Z} \left(\frac{\rho}{\lambda\lambda_D}; \Delta_0 \right) \sin \left(\frac{z}{\lambda\lambda_D} \right) - \mathfrak{Z} \left(\frac{\rho}{\lambda\lambda_D}; \frac{|z|}{\rho} \right) \sin \left(\frac{|z|}{\lambda\lambda_D} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (4)$$

$$2. \text{ Область } \frac{\rho}{|z|} \leq \frac{1}{\Delta_0};$$

$$\varphi(\mathbf{R}) = \frac{q}{R} + \frac{2q}{\lambda\lambda_D} \theta(-z) \mathfrak{Z} \left(\frac{\rho}{\lambda\lambda_D}; \Delta_0 \right) \sin \left(\frac{z}{\lambda\lambda_D} \right), \quad (5)$$

где

$$\mathfrak{Z}(a; b) = \int_0^b \frac{x dx}{x^2+1} J_0(ax), \quad (6)$$

$$\begin{pmatrix} F_1(x) \\ F_2(x) \end{pmatrix} = \operatorname{arctg} \sqrt{\frac{\Delta_0^2 - x^2}{1+x^2}} - \begin{pmatrix} \operatorname{arctg} \sqrt{\frac{z^2/\rho^2 - x^2}{1+x^2}} \\ \operatorname{arctg} \frac{|z|/\rho}{\sqrt{1+x^2}} \end{pmatrix}, \quad (7)$$

$\theta(z)$ – функция Хевисайда.

При $b \gg 1$ для функции $\mathfrak{Z}(a; b)$ получим следующее приближенное выражение:

$$\mathfrak{Z}(a; b) \cong K_0(a) + \operatorname{ci}(ab), \quad (8)$$

где $K_0(x)$ – функция Макдональда, $\operatorname{ci}(x)$ – интегральный косинус.

Выражения (5) и (8) с точностью до коэффициента 0.33 в аргументе интегрального косинуса совпадают с аналогичными, полученными в работе [4]. Разница эта возникает вследствие более грубого, чем в настоящей работе, приближения функции $\varepsilon(k, \omega)$, предложенного в [4].

Отметим, что в пределе малых ρ/λ_D эти выражения практически совпадают (вследствие условия $\lambda \gg 1$). Отметим также, что подынтегральные функции в выражении (4) являются элементарными, не имеют особенностей, и легко поддаются компьютерному расчету.

Как следует из выражений (4), (5), кильватерное поле играет существенную роль на расстояниях $R > \lambda\lambda_D$, когда можно пренебречь по сравнению с ним кулоновским потенциалом. В частности, при $\rho = 0$

$$\varphi(\mathbf{R}) \cong \frac{2q}{\lambda\lambda_D} \ln(\Delta_0) \theta(-z) \sin\left(\frac{z}{\lambda\lambda_D}\right); \quad (9)$$

при $z = 0$

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{R}) &\cong \frac{q}{\rho} - \frac{q}{\lambda\lambda_D} \int_0^{\Delta_0} \frac{dx}{\sqrt{x^2+1}} \sin\left(\frac{\rho x}{\lambda\lambda_D}\right) \cong \\ &\cong \frac{q}{\rho} - \frac{q}{\lambda\lambda_D} \left[I_0\left(\frac{\rho}{\lambda\lambda_D}\right) - L_0\left(\frac{\rho}{\lambda\lambda_D}\right) + \text{si}\left(\frac{\Delta_0 \rho}{\lambda\lambda_D}\right) \right] \cong \frac{q}{\rho} \cos\left(\frac{\Delta_0 \rho}{\lambda\lambda_D}\right), \end{aligned} \quad (10)$$

где $I_0(x)$ – функция Бесселя мнимого аргумента, $L_0(x)$ – функция Струве.

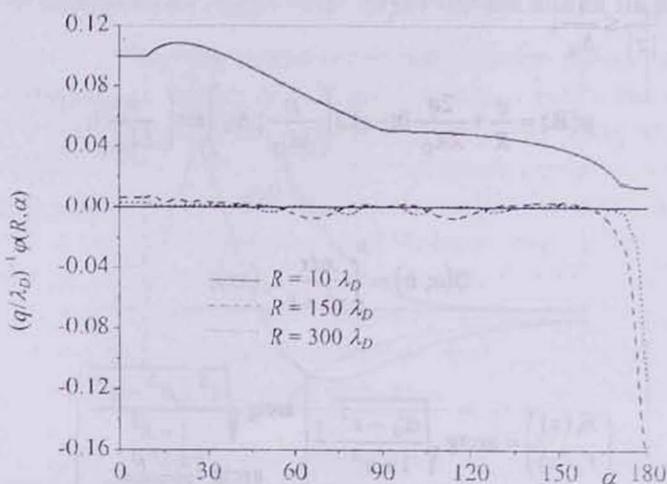


Рис.2. Зависимость безразмерного потенциала $(q/\lambda_D)^{-1} \varphi(R, \alpha)$ быстрой заряженной частицы ($\lambda = 20$) от угла α . Сплошная линия – $R = 10\lambda_D$, пунктирная линия – $R = 150\lambda_D$, мелкий пунктир – $R = 300\lambda_D$.

Отметим еще одно обстоятельство, вытекающее из формул (4), (5). При $R > \lambda\lambda_D$ и $\rho = R \sin \alpha$ (α – угол между векторами \mathbf{u} и \mathbf{R}) $\varphi(\mathbf{R})$ быстро убывает при фиксированном значении R с ростом величины угла α , так что можно считать, что стационарное в Ц-системе кильватерное поле “локализовано” внутри узкого (угол раствора $\alpha_0 \sim 1/\lambda$) конуса позади частицы (рис.2).

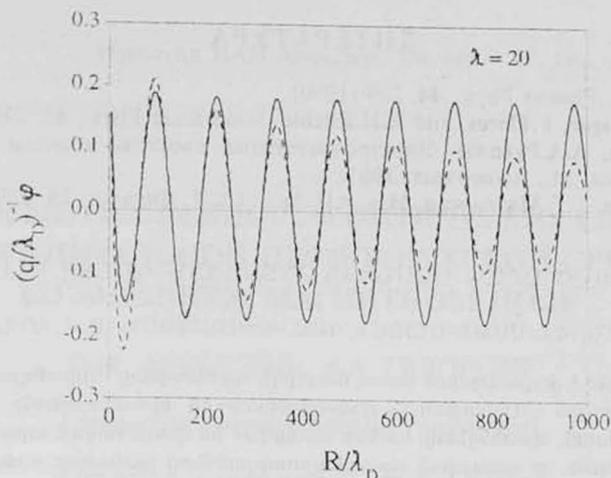


Рис.3. Зависимость безразмерного потенциала $(q/\lambda_D)^{-1} \varphi$ на траектории ($\alpha = \pi$) быстрой заряженной частицы ($\lambda = 20$) от расстояния R . Сплошная линия — выражение (5), пунктирная линия — выражение, полученное в [1].

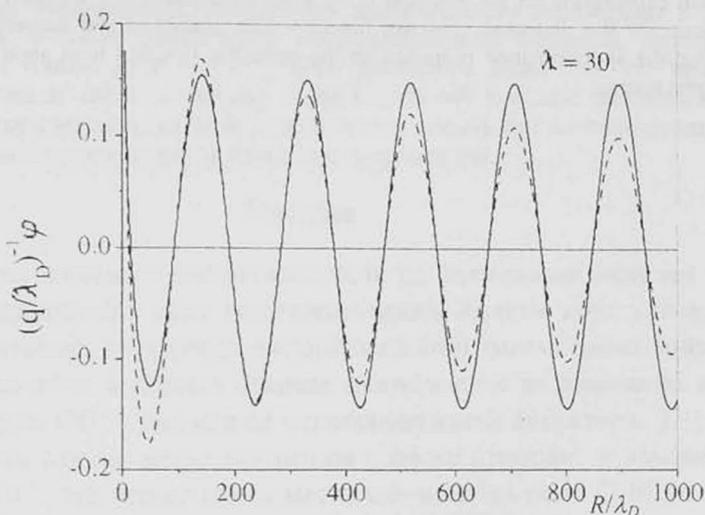


Рис.4. То же самое, что и на рис.3, для $\lambda = 30$.

В работе [1] проведен расчет потенциала при $\alpha < \alpha_0$, с достаточно хорошей точностью совпадающий с точными численными расчетами. На рис.3 и 4 выражение (5) сравнивается с аналогичным результатом, приведенным в работе [1]. Как видно на рис.3 и 4 и следует из аналитических выражений, соответствие тем лучше, чем больше параметр λ .

ЛИТЕРАТУРА

1. Th.Peter. J. Plasma Phys., **44**, 269 (1990).
2. P.M.Echenique, F.Flores, and R.H.Ritchie. Solid State Phys., **43**, 229 (1990).
3. В.П.Силин, А.А.Рухадзе. Электромагнитные свойства плазмы и плазмодобных сред. М., Атомиздат, 1961.
4. Э.А.Акопян, Г.Г.Матевосян. Изв. АН Арм. ССР, Физика, **20**, 259 (1985).

ԼԻՅՔԱՎՈՐՎԱԾ ԱՐԱԳ ՄԱՍՆԻԿԻ ՀԵՏՔԱՅԻՆ ԴԱՇՏԸ ՊԼԱՉՄԱՅՈՒՄ
Է.Ա. ՀԱՎՈՐՅԱՆ, Հ.Հ. ՄԱԹԵՎՈՍՅԱՆ, Բ.Ա. ԳԵՎՈՐԳՅԱՆ, Ա.Վ. ՀՈՎՀԱՆՆԻՍՅԱՆ

Դիտարկված է լիցքավորված արագ ճասնիկի պոտենցիալը Մաքսվելյան պլազմայում: Պլազմայի մոդելային դիէլեկտրական քափանցելիության օգտագործմամբ, տարածության կամայական կետում, պոտենցիալի համար ստացված են վերլուծական արտահայտություններ: Ցույց է տրված, որ ստացված արտահայտությունները բավարար չափով համընկնում են հայտնի արդյունքների հետ:

WAKE POTENTIAL OF FAST CHARGED PARTICLE MOVING IN PLASMA

E.A. HAKOBYAN, H.H. MATEVOSYAN, R.A. GEVORKYAN, A.V. HOVHANNISYAN

The potential of fast charged particle moving in Maxwellian plasma is considered. The analytical expressions for the potential in an arbitrary spatial point are derived, using model expression for the dielectric response function. The analytical and numerical calculations show that the approximation proposed for the dielectric function is in good agreement with the known results.

УДК 548.0

НЕКОТОРЫЕ ОСОБЕННОСТИ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СЛОЯ СПИРАЛЬНОЙ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СРЕДЫ ВО ВНЕШНЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

О.М. АРАКЕЛЯН, А.А. ГЕВОРГЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 27 декабря 2000 г.)

Приведены результаты исследования влияния внешнего магнитного поля на оптические свойства спиральной периодической среды (СПС) с учетом магнитооптической активности. Рассмотрен случай нормального падения света на слой, а магнитное поле предполагается направленным вдоль оси среды. Показано, что при определенных параметрах среды и внешнего магнитного поля возникает новая область дифракционного отражения. Исследованы особенности необратимости поглощения в такой системе, а также особенности поляризационных функций, характеризующих точное решение волнового уравнения. Показано, что при помощи такой системы можно создать условия для максимального поглощения света системой при одном направлении его распространения и подавления поглощения в обратном направлении.

Введение

Влияние внешнего магнитного поля на оптические свойства спиральных периодических сред (холестерических жидких кристаллов, хиральных смектиков, хиральных ферронематиков) рассмотрено многими авторами. При этом в первую очередь принимается во внимание изменение структуры СПС, вызванное переориентацией директора [1-3]. Однако возможны случаи, когда магнитное поле не приводит к изменению структуры СПС. Это может иметь место для немагнитных СПС ($\mu=1$), а также для СПС с отрицательной магнитной анизотропией при ориентации магнитного поля вдоль оси спирали. Кроме того, известно, что СПС можно создать искусственно [4-7]. Безотносительно к изменению структуры, внешнее магнитное поле может привести к изменению локального тензора диэлектрической проницаемости СПС и, в частности, к возникновению эффекта Фарадея. Одновременное присутствие оптической активности, обусловленной закрученностью структуры, и магнитооптической активности приводит к эффектам необратимости [8-10]. Нормальное падение света на СПС, помещенную во внешнее магнитное поле, направленное вдоль оси спирали, изучено в [8-11]. В [12] с по-



мощью динамической теории дифракции исследован эффект Фарадея в СПС при распространении света под углом к оси среды.

Отметим, что при слабой локальной анизотропии эффекты необратимости слабы и поэтому обычно не представляют практического интереса, несмотря на их уникальность. Были предприняты различные усилия для увеличения эффектов необратимости, что могло бы представлять также большой практический интерес. В работе [11] изучено влияние многократных отражений в конечном слое и диэлектрических границ на эффекты необратимости и, в частности, установлено, что с увеличением отличия средней диэлектрической проницаемости СПС и диэлектрических проницаемостей сред, граничащих со слоем СПС, необратимость прохождения сначала быстро увеличивается, а затем, начиная с некоторых значений, начинает уменьшаться. С другой стороны, в работах [13,14] исследованы особенности СПС с большой (также огромной) анизотропией и выявлены интересные особенности. В работе [15] изучены особенности СПС с большой анизотропией, находящейся во внешнем магнитном поле, при отсутствии поглощения и показано, что с увеличением локальной анизотропии СПС увеличивается и необратимость и что при определенных значениях внешнего магнитного поля и анизотропии среды такая система может работать как оптическим диодом, так и оптическим затвором.

В настоящей работе приведены результаты точного аналитического решения граничной задачи нормального прохождения света через слой поглощающей СПС конечной толщины, находящийся во внешнем магнитном поле, направленном вдоль оси среды. Отдельно рассмотрены случаи большой и огромной анизотропии и обсужден ряд возможных применений.

В [16-18] для описания поляризационных особенностей решения уравнений Максвелла для слоя СПС определен ряд поляризационных функций и исследованы их особенности. В настоящей работе приведены результаты по изучению влияния внешнего магнитного поля на поляризационные функции.

Дисперсионное уравнение и граничная задача

В случае присутствия внешнего магнитного поля, направленного вдоль оси СПС (ось z), тензоры диэлектрической и магнитной проницаемостей имеют вид

$$\varepsilon(z) = \varepsilon_m \begin{pmatrix} 1 + \delta \cos 2az & \pm \delta \sin 2az \pm ig & 0 \\ \pm \delta \sin 2az \mp ig & 1 - \delta \cos 2az & 0 \\ 0 & 0 & 1 - \delta \end{pmatrix}, \quad \mu(z) = I, \quad (1)$$

где $\varepsilon_m = (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)/2$, $\delta = (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)/(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)$, $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ — главные значения локального

тензора диэлектрической проницаемости, $\mathbf{g} = \mathbf{g}(\mathbf{H}_{ext})$ – вектор гирации, $a = 2\pi d\sigma$, σ – шаг спирали, I – единичная матрица. Как известно, под действием магнитного поля не только возникает магнитооптическая активность, описываемая параметром g , но и меняются значения компонент локального тензора ϵ_{ij} и шаг спирали σ [1-3,10]. В (1) под ϵ_m , δ , σ следует понимать их значения, уже изменившиеся под действием внешнего магнитного поля. При наличии поглощения будем иметь: $\epsilon_{1,2} = \epsilon'_{1,2} + i\epsilon''_{1,2}$.

Подставим (1) в волновое уравнение

$$(\nabla^2 + \frac{\omega^2}{c^2} \hat{\epsilon})\mathbf{E} = 0 \quad (2)$$

и для случая распространения света вдоль оси среды будем искать его решение в виде

$$\mathbf{E}(z,t) = \sum_{j=1}^4 \{E_j^+ \mathbf{n}_+ \exp[i \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{\epsilon_m} (\chi + b)z] + E_j^- \mathbf{n}_- \exp[i \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{\epsilon_m} (-\chi + b)z]\} \exp(-i\omega t), \quad (3)$$

где E_j^\pm – амплитуды собственных решений, \mathbf{n}_\pm – орты круговых поляризаций, \mathbf{b} – безразмерный волновой вектор в поворачивающейся вместе с директором системе координат, $\chi = \lambda / (\sigma \sqrt{\epsilon_m})$, λ – длина волны в вакууме.

Подставляя (3) в (2), получаем следующее дисперсионное уравнение относительно b [8-10]:

$$b^4 - 2(1 + \chi^2)b^2 - 4\chi\eta b + (1 - \chi^2)^2 - \delta^2 - \eta^2 = 0, \quad (4)$$

где $\eta = g/\epsilon_m$.

Таким образом, в отличие от случая $g = 0$, при котором дисперсионное уравнение биквадратное, в этом случае оно является полным уравнением четвертой степени. Решение уравнения (4) имеет вид

$$b_{1,2} = \sqrt{\frac{s}{2}} \pm \sqrt{\left(1 + \chi^2 - \frac{s}{2} + \frac{2\eta\chi}{\sqrt{2s}}\right)}, \quad b_{3,4} = -\sqrt{\frac{s}{2}} \pm \sqrt{\left(1 + \chi^2 - \frac{s}{2} - \frac{2\eta\chi}{\sqrt{2s}}\right)}, \quad (5)$$

где

$$s = \frac{2(1 + \chi^2)}{3} + u + \left[(1 - \chi^2)^2 - \delta^2 - \eta^2 + \frac{(1 + \chi^2)^2}{3} \right] / (3u),$$

$$u = \left[(1 + \chi^2) \left((1 - \chi^2)^2 - \delta^2 - \eta^2 - \frac{(1 + \chi^2)^2}{9} \right) \pm \sqrt{\left[(1 + \chi^2) \left(\delta^2 + \eta^2 + \frac{(1 + \chi^2)^2}{9} - (1 - \chi^2)^2 \right) \right]^2 - \left(\delta^2 + \eta^2 + \frac{(1 + \chi^2)^2}{3} - (1 - \chi^2)^2 \right)^3} \right]^{1/3}$$

Как известно [8-12], в отсутствие магнитного поля кривые b_j симметричны относительно оси частот (оси λ). При наличии поля симметрия относительно оси частот нарушается: графики резонансных b_j смещаются в одну сторону (параллельно оси b_j), графики нерезонансных b_j – в обратную сторону, в чем и выражается необратимость волн. Как показывают вычисления, внешнее магнитное поле приводит также к смещению области дифракционного отражения. Это смещение, обусловленное только магнитооптической активностью СПС (в отличие от смещения, обусловленного изменениями шага спирали), направлено в

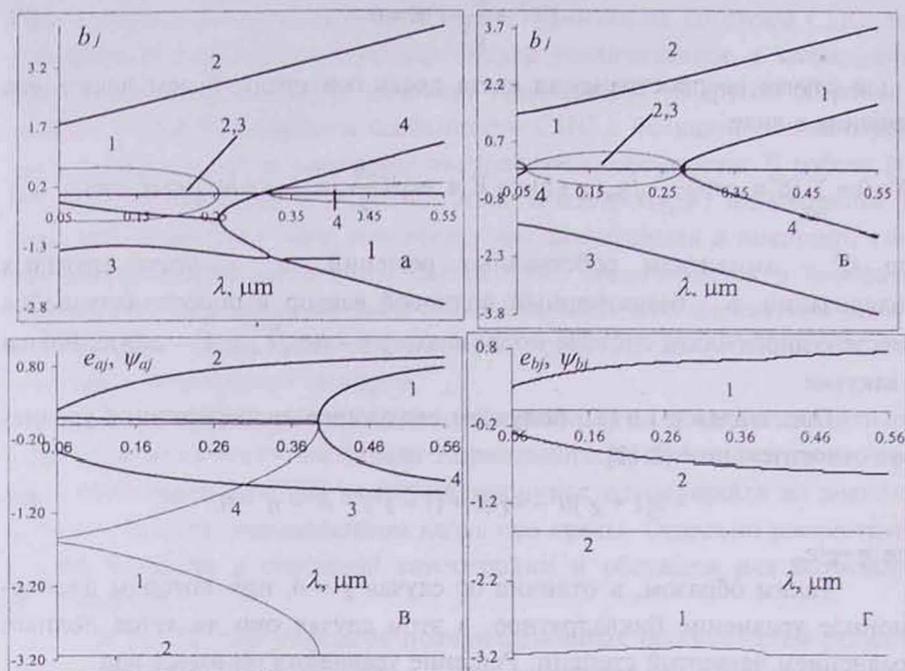


Рис.1. а), б) Зависимость безразмерных волновых чисел b_j от длины волны λ при $g = 0.275$ (а) и при $g = 0$ (б). $\delta = 0.95$, $\epsilon_m = 0.5$, $\sigma = 0.4$ мкм. Сплошные кривые соответствуют реальным частям b_j , а пунктирные – мнимым частям b_j . в), г) Зависимость эллиптичностей e_{aj} , e_{bj} и азимутов ψ_{aj} , ψ_{bj} ($j = 1, 2, 3, 4$) от длины волны λ . $\delta = 0.95$, $g = 0.1$, $\sigma = 0.4$ мкм, $\epsilon = \epsilon_m$.

сторону коротких волн (квадратичный по g эффект). Оно очень слабое и, например, при слабой анизотропии ($\delta \ll 1$) составляет всего 1.5 \AA ($g = \pm 0.1$). Уникальная ситуация возникает при большой анизотропии δ или при больших значениях параметра гирации g . На рис.1а,б представлены зависимости b_j от длины волны при наличии (а) и при отсутствии (б) внешнего магнитного поля. Как видно из рисунка, при $g \neq 0$ существуют две области, где два из четырех волновых чисел комплексные (полностью не реальные), и область пропускания между ними (все

волновые числа реальные). При увеличении параметра g или анизотропии δ ширина области пропускания стремится к нулю, и при определенных значениях этих параметров во всей спектральной области два из четырех волновых чисел комплексные. Таким образом, внешнее магнитное поле приводит к возникновению новой области дифракционного отражения.

Между E_j^+ и E_j^- имеют место соотношения

$$\zeta_j^a = E_j^- / E_j^+ = (1 - i\alpha_j) / (1 + i\alpha_j), \quad (6)$$

где $\alpha_j = (2\chi b_j + g/\varepsilon_m) / (1 - \delta - \chi^2 - b_j^2)$. Величина ζ_j^a определяет поляризацию собственных мод. Особенности поляризации ζ_j^a в случае $g = 0$ при слабой анизотропии подробно изучены в работе [2].

Эллиптичности поляризации e_{oj} и азимуты поляризации ψ_{oj} собственных мод удовлетворяют следующим соотношениям: $e_{a3,4}^- = -e_{a1,2}$, $\psi_{a3,4}^- = -(\psi_{a1,2} + \pi)$. Внешнее магнитное поле снимает вырождение (симметрия относительно оси частот) этих поляризаций и в данном случае уже имеем $e_{a3,4}^- \neq -e_{a1,2}$, $\psi_{a3,4}^- \neq -(\psi_{a1,2} + \pi)$. На рис. 1в представлены зависимости эллиптичностей e_{oj} (сплошные кривые) и азимутов ψ_{oj} (штриховые кривые) от длины волны при большой анизотропии ($\delta \sim 1$) в случае наличия внешнего магнитного поля.

Рассмотрим нормальное падение света на полупространство, заполненное средой со СПС. Ось z тензора $\hat{\varepsilon}$ совпадает с осью среды, которая, в свою очередь, перпендикулярна к граничной поверхности. Внешнее магнитное поле параллельно оси среды. Для составления граничных условий следует использовать выражение (3) для поля в среде. Однако в суперпозиции (3), естественно, надо оставить те слагаемые, которые затухают при распространении света в глубь среды. Отсюда следует, что при рассмотрении граничной задачи отражения света от полупространства СПС в сумме (3) $j = 1, 2$. При определенных поляризациях $\xi_j^b = E_{in}^- / E_{in}^+$ падающей волны (E_{in}^- , E_{in}^+ — циркулярные компоненты амплитуды поля падающей волны) в среде не возбуждается одна из собственных волн E_j^\pm . Из граничных условий для $\xi_j^b (E_j^\pm = 0)$ имеем:

$$\xi_j^b = [\alpha_j - \beta_j + i(1 + \gamma_j)] / [\alpha_j - \beta_j - i(1 + \gamma_j)], \quad j = 1, 2, \quad (7)$$

где $\beta_j = -(i\chi + \alpha_j b_j)$, $\gamma_j = \alpha(b_j - i\alpha_j \chi)$, $\alpha = \sqrt{\varepsilon_m / \varepsilon}$, ε — диэлектрическая проницаемость среды, граничащей с полупространством СПС. При этом предполагается, что параметром магнитооптической активности граничащей среды можно пренебречь по сравнению с параметрами активности СПС.

При слабой анизотропии в случае $g = 0$ ξ_1^b и ξ_2^b представляют собой две квазикруговые поляризации. При отсутствии поглощения и при $\alpha = 1$ они практически ортогональны: $\xi_1^b \xi_2^{b*} = -1$. При наличии внешнего магнитного поля поляризации ξ_1^b и ξ_2^b неортогональны, причем эллиптичности этих поляризаций существенно отличаются друг от друга. На

рис.1г представлены зависимости эллиптичностей $e_{b1,2}$ (сплошные кривые) и азимутов $\psi_{b1,2}$ (штриховые кривые) от длины волны при большой анизотропии ($\delta \sim 1$) в случае наличия внешнего магнитного поля. Как видно из рисунка, большая анизотропия приводит к значительному отличию поляризации ξ_j^b от круговых.

Граничная задача для слоя СПС

Рассмотрим граничную задачу прохождения света через слой СПС конечной толщины, помещенный во внешнее магнитное поле. Направление внешнего магнитного поля совпадает с направлением оси среды, а она в свою очередь перпендикулярна к граничным поверхностям. Свет падает на слой по нормали. При рассмотрении этой задачи можно определить уже четыре поляризационные функции ξ_j^b , поскольку в этом случае в среде возбуждаются все четыре собственные моды. Из граничных условий для компонент амплитуд собственных мод E_j^+ получаем:

$$E_j^+ = 2(1+i\alpha) \left\{ \sum e_{klm} [E_{in}^+(\alpha_k^- + i\gamma_k^+) + E_{in}^-(\alpha_k^- - i\gamma_k^+)] Y_l^- \alpha_m^+ f_1 f_2 \right\} / \Delta, \quad (8)$$

где $\Delta = \sum_{i,j,k,l} e_{ijkl} \gamma_i^+ \alpha_j^- \gamma_k^- \alpha_l^+ f_k f_l$, $a_i^{\pm} = a_i \pm b_i$, $\gamma_i^{\pm} = 1 \pm \gamma_i$, $f_i = \exp(i2\pi \sqrt{\epsilon_m} b_i d / \lambda)$,

e_{ijkl} – символ Леви-Чивита, d – толщина слоя.

Из условия $E_j^+ = 0$ для ξ_j^b получаем:

$$\xi_i^b = - \frac{\sum_{m,k,l=1}^4 e_{imkl} (\alpha_m^- - i\gamma_m^+) \gamma_k^- \alpha_l^+ f_k f_l}{\sum_{m,k,l=1}^4 e_{imkl} (\alpha_m^- + i\gamma_m^+) \gamma_k^- \alpha_l^+ f_k f_l}. \quad (9)$$

На рис.2а представлены зависимости эллиптичностей e_{bj} (сплошные кривые) и азимутов ψ_{bj} (штриховые кривые) от длины волны при большой анизотропии ($\delta \sim 1$) в случае наличия внешнего магнитного поля.

При рассмотрении задачи прохождения света через слой конечной толщины определяются также собственные поляризации ξ_1^c и ξ_2^c . Это две поляризации падающего света, которые не изменяются при его прохождении через систему. При отсутствии поглощения и при $\alpha = 1$ в случае отсутствия внешнего магнитного поля имеем $\xi_1^b = \xi_3^b = \xi_1^c$ и $\xi_2^b = \xi_4^b = \xi_2^c$. Эти поляризации не зависят от толщины слоя и совпадают соответственно с ξ_1^b и ξ_2^b полупространства. При слабой анизотропии они квазикруговые. При наличии внешнего магнитного поля либо поглощения, или при $\alpha \neq 1$ все четыре поляризации ξ_j^b отличаются друг от друга и не совпадают с собственными поляризациями. Это означает, что, в отличие от случая, когда отсутствуют поглощение и внешнее маг-

нитное поле и когда $\alpha=1$ (в этих случаях в слое среды могут возбуждаться две или четыре собственные моды), в этом случае при определенных поляризациях падающего света могут возбуждаться три собственные моды: две, идущие вперед, и только одна, идущая назад, и наоборот. На рис.2б представлены зависимости эллиптичности e_{c1} (сплошная кривая) и азимута ψ_{c1} (штриховая кривая) от длины волны при большой анизотропии ($\delta \sim 1$) в случае наличия внешнего магнитного поля.

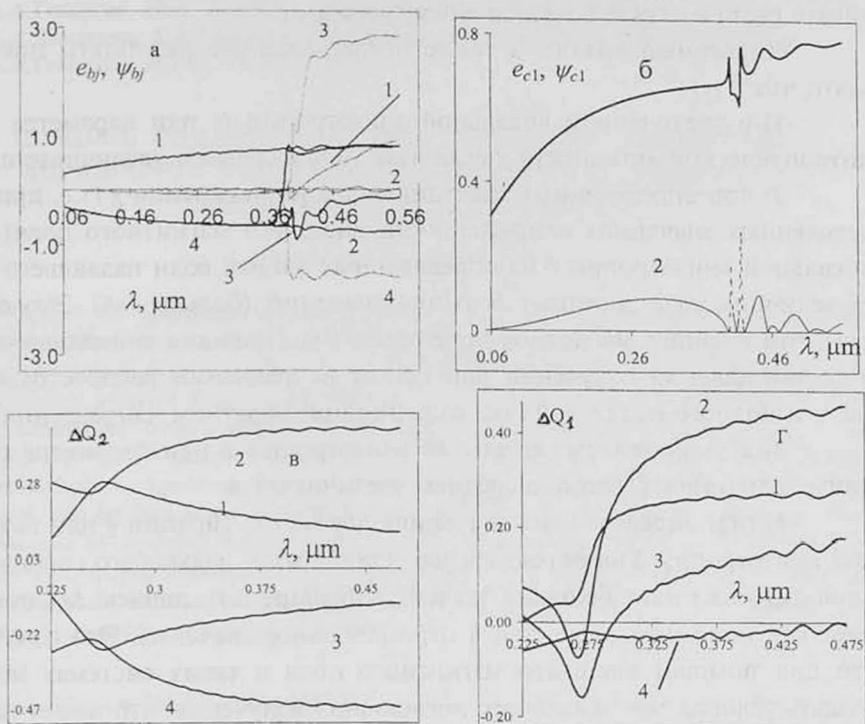


Рис.2. а), б) Зависимость эллиптичностей e_{bj} (а), e_{c1} (б) и азимутов ψ_{bj} (а), ψ_{c1} (б) ($j=1,2,3,4$) от длины волны λ . $\epsilon = \epsilon_m$, $d = 5\sigma$. Вторая собственная поляризация приблизительно ортогональна к первой. в), г) Зависимость ΔQ_2 (в) и ΔQ_1 (г) от длины волны λ , при большой анизотропии ($\delta = 0.9$), в случае наличия внешнего магнитного поля ($g = 0.25$) при различных поляризациях падающего света. 1 – линейная вдоль оси x поляризация, 2 – правая круговая поляризация, 3 – линейная вдоль оси y поляризация, 4 – левая круговая поляризация. Спираль правая. $\text{Im}\epsilon_1 = \text{Im}\epsilon_2 = 0.01$, $\epsilon_m = 0.5$, $\epsilon = \epsilon_m$, $d = 5\sigma$, $\sigma = 0.4$ мкм.

Численный анализ необратимости прохождения, а также учет влияния внешнего магнитного поля на прохождение подробно сделаны в работе [15]. В следующем параграфе мы обсудим особенности необратимости поглощения света слоем при наличии большой анизотропии.

Особенности поглощения света при большой локальной анизотропии

На рис.2в представлена зависимость необратимости поглощения

излучения в слое $\Delta Q_2 = Q(g) - Q(-g)$ ($Q = 1 - (R+T)$, R, T – коэффициенты отражения и прохождения по интенсивности, соответственно, $Q(g)$ – поглощение света при совпадении направлений падающего света и внешнего магнитного поля, а $Q(-g)$ – поглощение света, когда эти направления противоположны) от длины волны λ при различных поляризациях падающего света. На рис.2г представлена зависимость величины $\Delta Q_1 = Q(g) - Q(0)$ от длины волны λ при различных поляризациях падающего света в случае большой анизотропии.

Численный анализ, а также представленные результаты показывают, что

1) с увеличением локальной анизотропии δ или параметра магнитооптической активности g величина $|\Delta Q_2|$ в среднем увеличивается;

2) при определенных значениях параметра гирации g (т.е. при определенных значениях напряженности внешнего магнитного поля) или локальной анизотропии δ на определенных длинах волн падающего света величина $|\Delta Q_2|$ достигает больших значений (больше 0.4). Это означает, что внешнее магнитное поле создает условие для аномально сильного поглощения излучения при одном направлении распространения света и полного подавления поглощения при обратном направлении;

3) с увеличением локальной анизотропии δ или параметра гирации g величина $|\Delta Q_1|$ тоже в среднем увеличивается;

4) при определенных значениях параметра гирации g или локальной анизотропии δ на определенных длинах волн падающего света величина $|\Delta Q_1|$ достигает больших значений (больше 0.4), причем ΔQ_1 принимает как положительные, так и отрицательные значения. Это означает, что при помощи внешнего магнитного поля в таких системах можно создать условия максимального поглощения излучения, что может найти широкое применение в лазерах.

Как показывает детальный анализ, эти свойства обусловлены особенностями собственных поляризаций и, в частности, их зависимостью от направления внешнего магнитного поля.

ЛИТЕРАТУРА

1. П. Де Жен. Физика жидких кристаллов. М., Мир, 1977.
2. В.А.Беляков. Дифракционная оптика периодических сред сложной структуры. М., Наука, 1988.
3. С.Чандрасекар. Жидкие кристаллы. М., Мир, 1980.
4. Г.Герритсен, Р.Ямагучи. УФН, **107**, 705 (1972).
5. D.Sunal Paul, A.Lakhtakia, M.Messier. Opt. Commun., **158**, 119 (1998).
6. P.I.Rovira, R.A.Yarussi, R.W.Collins, R.Messier, V.C.Venugopal, A.Lakhtakia, K.Robbie, M.J.Brett. Appl. Phys. Lett., **71**, 1180 (1997).
7. I.Hodgkinson, Q.H.Wu, B.Knight, A.Lakhtakia, P.I.Rovira. Appl. Opt., **39**, 642 (2000).
8. О.С.Ерицян. Изв. АН АрмССР, Физика, **13**, 347 (1978).
9. О.С.Ерицян. Изв. АН АрмССР, Физика, **19**, 306 (1984).

10. Օ.Տ.Երիցյան. Оптика гиротропных сред и холестерических жидких кристаллов, Ереван, Айастан, 1988.
11. Ա.Ա.Գեւորջյան. Ученые записки ЕГУ, 2, 66 (1987).
12. Վ.Ա.Киеня, И.В.Семченко. Кристаллография, 39, 514 (1994).
13. Գ.Ա.Վարդանյան, Ա.Ա.Գեւորջյան, Օ.Տ.Երիցյան և ժր. Кристаллография, 43, 783 (1998).
14. Օ.Մ.Արաքելյան, Ա.Ա.Գեւորջյան, Օ.Տ.Երիցյան. Изв. НАН Армении, Физика, 35, 255 (2000).
15. Ա.Ա.Գեւորջյան. ЖТФ (в печати).
16. Ա.Ա.Գեւորջյան. Изв. НАН Армении, Физика, 35, 202 (2000).
17. Գ.Ա.Վարդանյան, Ա.Ա.Գեւորջյան, Օ.Տ.Երիցյան. Опт. и спектр., 85, 640 (1998).
18. Ա.Ա.Գեւորջյան, ЖТФ, 70, 82 (2000).

ԱՐՏԱՔԻՆ ՄԱԳՆԻՏԱԿԱՆ ԴԱՇՏՈՒՄ ԳՏՆՎՈՂ ՊԱՐՈՒՐԱՅԻՆ
ՊԱՐԲԵՐԱԿԱՆ ԿԱՌՈՒՅՎԱԾՔՈՎ ՄԻՋԱՎԱՅՐԻ ՇԵՐՏԻ ՈՐՈՇ
ՕՊՏԻԿԱԿԱՆ ՀԱՏԿՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԸ

Հ. Մ. ԱՌԱՔԵԼՅԱՆ, Ա.Հ. ԳԵՎՈՐԳՅԱՆ

Բերված են պարբերական պարտրային կառուցվածքով միջավայրի օպտիկական հատկությունների վրա արտաքին մագնիսական դաշտի ազդեցության արդյունքները մագնիսօպտիկական ակտիվության հաշվառմամբ: Դիտարկված է միջավայրի շերտի վրա լույսի նորմալ անկման դեպքը, և ենթադրված է, որ մագնիսական դաշտը ուղղված է միջավայրի առանցքով: Ցույց է տրված, որ միջավայրի պարամետրերի և մագնիսական դաշտի որոշակի արժեքների դեպքում առաջանում է նոր դիֆրակցիոն անդրադարձման տիրույթ: Ուսումնասիրված է կլանման անշրջելիության առանձնահատկությունները այդպիսի համակարգում, ինչպես նաև այն բևեռացման ֆունկցիաների առանձնահատկությունները, որոնք բնութագրում են այդպիսի համակարգի ալիքային հավասարման ճշգրիտ լուծումը: Ցույց է տրված, որ այդպիսի համակարգի օգնությամբ կարելի է ստեղծել այնպիսի պայմաններ, երբ լույսը կլանվում է անոմալ շատ, երբ այն տարածվում է մի ուղղությամբ, և կլանումը ճնշվում է, երբ այն տարածվում է հակառակ ուղղությամբ:

SOME OPTICAL PROPERTIES OF A LAYER OF MEDIUM WITH
A HELICAL PERIODIC STRUCTURE IN AN EXTERNAL MAGNETIC FIELD

H.M.ARAKELYAN, A.H.GEVORGYAN

Results of investigations of influence of an external magnetic field on the optical properties of helical periodic media with allowance for the magneto-optical activity are presented. The case of normal incidence of light on the layer is considered, and it is assumed that the external magnetic field is directed along the medium axis. It is shown that at certain values of the medium parameters and external magnetic field a new band of diffraction reflection arises. Special features of the absorption irreversibility and polarization functions characterizing the exact solution of the wave equation for such systems are studied. It is shown that with the use of such systems one can create conditions for the anomalously strong absorption of light in one direction of its propagation and suppression of absorption in the opposite direction.

УДК 535.3

РАСПРОСТРАНЕНИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ В ДИССИПАТИВНОЙ ДВУХУРОВНЕВОЙ СРЕДЕ С КВАДРАТИЧНОЙ НЕЛИНЕЙНОСТЬЮ

А.Г. БАГДОЕВ¹, В.О. ЧАЛТЫКЯН², А.В. ШЕКОЯН¹

¹Институт механики НАН Армении

²Институт физических исследований НАН Армении

(Поступила в редакцию 8 октября 2001 г.)

Изучено распространение пучка интенсивного электромагнитного излучения в диссипативной двухуровневой среде. Выведено нелинейное уравнение Шредингера, в котором учитывается как линейная, так и нелинейная диссипация. Получены формулы, определяющие положение фокальных точек и пятен. Результаты обобщены для задачи интерферометра.

Введение

Процессы распространения электромагнитных волн, в частности, лазерного излучения, в нелинейных средах с квантовыми свойствами интенсивно изучаются последние тридцать лет [1-10]. В работе [2] для описания распространения лазерного луча в керровской непоглощающей среде с кубической нелинейностью выведено уравнение модуляции для амплитуды электрического поля в квазиоптическом приближении. Это уравнение называют также нелинейным уравнением Шредингера. Авторами работы [3] впервые было получено уравнение для радиуса узких пучков и найдено его решение. В этом приближении можно определить расположение фокусов и фокальных пятен, условия самофокусировки и т.п.

В работах [1,6,9] получено квантово-механическое выражение для поляризации среды, которое затем используется для выведения различных модификаций уравнения модуляции (насыщение, многофотонное взаимодействие и т.д.).

Распространение излучения при наличии поглощения рассмотрено в [3], где дается приближенное решение задачи. В работах [4,7] выведено уравнение модуляции с учетом как линейного, так и нелинейного поглощения, однако эти уравнения решаются численно.

В работах [11,12] удалось вывести для упругих волн нелинейное

уравнение Шредингера с комплексным коэффициентом у нелинейного члена и найти аналитическое решение для узких осесимметричных пучков.

Распространение двух нелинейных волн в недиссипативной среде рассмотрено в работах [13,14], где сделана попытка обобщить известные результаты на интерферометры и резонаторы. В статье [15] результаты [11,12] обобщены на случай слоя.

Целью настоящей работы является, модифицируя математический метод, использованный в [11,12,15], вывести из системы уравнений для поля и для матрицы плотности среды уравнение модуляции с комплексным нелинейным коэффициентом, найти аналитическое решение для пучка, исследовать влияние нелинейного поглощения на поведение пучка (образование фокусов, фокальных пятен, самофокусировка и т.д.), а также обобщить результаты на резонаторы и интерферометры.

Исходные уравнения

Распространение оптического излучения в среде исследуется, как правило, путем решения самосогласованной задачи. Обычно поле излучения описывается классически, а среда – квантово-механически. В этом случае электрическое поле волны удовлетворяет волновому уравнению, следующему из уравнений Максвелла:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial t^2}, \quad (1)$$

где поляризация среды \mathbf{P} определяется уравнением

$$\mathbf{P} = N \text{Sp}(\epsilon \mathbf{P}), \quad (2)$$

N – плотность числа атомов среды, $\hat{\rho}$ – эрмитова матрица плотности среды, удовлетворяющая уравнению

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] \quad (3)$$

с гамильтонианом

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 + \hat{H}_2. \quad (4)$$

Здесь \hat{H}_0 описывает внутреннее состояние атомов среды, \hat{H}_1 – их взаимодействие с полем излучения, которое обычно считается дипольным: $\hat{H}_1 = -dE$ (d – дипольный момент атома), а \hat{H}_2 обусловлен релаксационными процессами.

Предположим далее, что атомы – двухуровневые, с уровнями определенной (противоположной) четности ($d_{11} = d_{22} = 0$), среда ориентационно и спектрально однородна, а поле линейно-поляризовано ($d\mathbf{E} = dE$).

Тогда выражения (1)-(4) приводят к следующей системе уравнений [1,9]:

$$\frac{\partial \rho_{21}}{\partial t} = -(i\omega_0 + \gamma)\rho_{21} - \frac{i}{\hbar} d_{21} E (\rho_{22} - \rho_{11}), \quad (5)$$

$$\frac{\partial \rho_{22}}{\partial t} = -\gamma_2 \rho_{22} - \frac{i}{\hbar} E (d_{12} \rho_{21} - d_{21} \rho_{12}), \quad (6)$$

$$\frac{\partial \rho_{11}}{\partial t} = -\gamma_1 \rho_{11} + \gamma_{21} \rho_{22} + \frac{i}{\hbar} E (d_{12} \rho_{21} - d_{21} \rho_{12}), \quad (7)$$

$$-\Delta_{\perp} E + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} = -\frac{N}{c^2} \left(d_{12} \frac{\partial^2 \rho_{21}}{\partial t^2} + d_{21} \frac{\partial^2 \rho_{12}}{\partial t^2} \right), \quad (8)$$

$$\rho_{21} = \rho_{12}^*, \quad d_{21} = d_{12}^*, \quad (9)$$

где $\Delta_{\perp} \equiv (\partial^2 / \partial y^2) + \partial^2 / \partial z^2$, ось x – направление распространения излучения, γ , $\gamma_{1,2}$ и γ_{21} суть скорости затухания соответствующих элементов матрицы плотности ($\gamma_{1,2}$ – полные скорости распада соответствующих уровней, а γ_{21} – скорость спонтанного перехода с уровня 2 на уровень 1), ω_0 – частота атомного перехода.

Используемое приближение и вывод основного уравнения

Поскольку ρ_{21} может быть комплексной величиной, а E , ρ_{11} и ρ_{22} действительны, то решение системы уравнений (5)-(9) будем искать в следующем виде:

$$E = \frac{1}{2} \{ E_0(r, t) e^{i(kx - \omega t)} + c.c. \},$$

$$\rho_{11,22} = \frac{1}{2} \{ \rho_{1,2}(r, t) e^{2i(kx - \omega t)} + \rho_{01,02}(r, t) + c.c. \}, \quad (10)$$

$$\rho_{21} = \rho_0(r, t) e^{i(kx - \omega t)}.$$

В выражениях (10) E_0 , $\rho_{1,2}$, ρ_0 – медленно меняющиеся, вообще говоря, комплексные амплитуды, а $\rho_{01,02}$ – неосциллирующие (“свободные”) члены, которые, не теряя общности, можно для упрощения расчетов считать действительными.

Подставляя (10) в систему уравнений (5)-(9), усредняя по периоду волны (при этом быстроосциллирующие члены зануляются), получим новую систему уравнений для амплитуд и свободных членов:

$$\frac{\partial \rho_0}{\partial t} + (i\varepsilon + \gamma)\rho_0 = -\frac{id}{4\hbar} \left[2E_0(\rho_{02} - \rho_{01}) + E_0^*(\rho_2 - \rho_1) \right], \quad (11)$$

$$\frac{\partial \rho_{02}}{\partial t} = -\gamma_2 \rho_{02} + \frac{i}{2\hbar} (dE_0 \rho_0^* - d^* E_0^* \rho_0), \quad (12)$$

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t} - 2i\omega \rho_2 = -\gamma_2 \rho_2 - \frac{id^*}{2\hbar} \rho_0 E_0, \quad (13)$$

$$\frac{\partial \rho_{01}}{\partial t} = -\gamma_1 \rho_{01} + \gamma_{21} \rho_{02} - \frac{i}{2\hbar} (dE_0 \rho_0^* - d^* E_0^* \rho_0), \quad (14)$$

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} - 2i\omega \rho_1 = -\gamma_1 \rho_1 + \gamma_{21} \rho_2 + \frac{id^*}{2\hbar} \rho_0 E_0, \quad (15)$$

$$\Delta_{\perp} E_0 + \left(\frac{\partial^2 E_0}{\partial x^2} + 2ik \frac{\partial E_0}{\partial x} - k^2 E_0 \right) - \frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial^2 E_0}{\partial t^2} - 2i\omega \frac{\partial E_0}{\partial t} - \omega^2 E_0 \right) = -\frac{N\omega^2 d^*}{c^2} \rho_0, \quad (16)$$

$$\varepsilon \equiv \omega_0 - \omega.$$

Будем рассматривать импульсы, длительность которых превышает величину ε^{-1} . Поскольку амплитуды и "постоянные", входящие в (10), мало меняются по сравнению с экспонентами, можно отбросить производные в уравнениях (11), (13) и (15) и найти ρ_0 , ρ_{12} из соответствующих алгебраических уравнений. Подставляя их в уравнения (12), (14) и (16), разлагая при этом ρ_0 в ряд по $|E_0|^2$ и отбрасывая члены порядка $|E_0|^4$ и выше, получим следующую замкнутую систему уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{01}}{\partial t} &= -\gamma_1 \rho_{01} + \gamma_{21} \rho_{02} - i\gamma |d|^2 \frac{|E_0|^2 (\rho_{02} - \rho_{01})}{2\hbar^2 (\varepsilon^2 + \gamma^2)}, \\ \frac{\partial \rho_{02}}{\partial t} &= -\gamma_2 \rho_{02} + i\gamma |d|^2 \frac{|E_0|^2 (\rho_{02} - \rho_{01})}{2\hbar^2 (\varepsilon^2 + \gamma^2)}, \\ -\Delta_{\perp} E_0 - \left(\frac{\partial^2 E_0}{\partial x^2} + 2ik \frac{\partial E_0}{\partial x} - k^2 E_0 \right) + \\ + \frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial^2 E_0}{\partial t^2} - 2i\omega \frac{\partial E_0}{\partial t} - \omega^2 E_0 \right) &= \frac{\sigma N \omega}{c\gamma} (\rho_{01} - \rho_{02}) (\varepsilon + i\gamma) (1 - \zeta |E_0|^2) E_0, \end{aligned} \quad (17)$$

где σ - резонансное сечение поглощения

$$\sigma = |d|^2 \omega \gamma [2\hbar c (\varepsilon^2 + \gamma^2)]^{-1},$$

$$\zeta = |d|^2 \left(\omega + i \frac{\Gamma}{4} \right) \left[8\hbar (i\gamma - \varepsilon) \left(i \frac{\gamma_1}{2} + \omega \right) \left(i \frac{\gamma_2}{2} + \omega \right) \right]^{-1},$$

а величина $\Gamma = \gamma_1 + \gamma_2 - \gamma_{21}$ есть суммарная скорость распада "вбок"

обоих уровней.

Будем рассматривать распространение импульсов, длительность которых удовлетворяет условию $\varepsilon^{-1} \ll t \ll \gamma_{1,2,21}^{-1}$. Во многих оптических экспериментах, где расстройки резонанса могут быть порядка 10^{10} – 10^{11} с⁻¹, а времена релаксации изучаемых сред – порядка 10^8 – 10^9 с⁻¹, приведенному условию удовлетворяют наносекундные импульсы. В этом приближении можно считать разность населенностей в последнем уравнении (17) постоянной. Тогда для функции $\psi(x, y, z)$, определяемой соотношением

$$E_0 = \psi(x, y, z) \exp\left[-\frac{\sigma N}{2}(\rho_{01} - \rho_{02})x\right], \quad (18)$$

получим из этого уравнения в квазиоптическом приближении

$$\Delta_{\perp} \psi + 2ik \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\sigma N \varepsilon \omega}{c \gamma} (\rho_{01} - \rho_{02}) \psi = -(\zeta_1 + i \zeta_2) |\psi|^2 \psi, \quad (19)$$

где

$$\zeta_1 = T_1 \operatorname{Re} T_2, \quad \zeta_2 = T_1 \operatorname{Im} T_2, \quad T_1 = \exp\left[-\sigma N (\rho_{01} - \rho_{02}) x\right], \\ T_2 = \sigma N \zeta \frac{\omega}{c} (\rho_{01} - \rho_{02}) \left(i + \frac{\varepsilon}{\gamma}\right).$$

Уравнения для двух волн, распространяющихся в обратных направлениях (задача интерферометра)

Пусть теперь излучение находится между двумя зеркалами, т.е. имеются две волны, бегущие в противоположных направлениях. Решение уравнений (5)–(8) будем искать в виде суммы двух слагаемых, одно из которых соответствует волне, распространяющейся вправо, другое – влево. Тогда, аналогично (10),

$$E = E_1 + E_2 = \frac{1}{2} [E_{01} e^{ip} + E_{02} e^{iq} + c.c.],$$

$$\rho_{11,22} = \rho_{11,22}^I + \rho_{11,22}^{II} = \frac{1}{2} [\rho_{1,2}^I e^{2ip} + \rho_{1,2}^{II} e^{2iq} + \rho_{01,02}^I + \rho_{01,02}^{II} + c.c.], \quad (20)$$

$$\rho_{21} = \rho_{21}^I + \rho_{21}^{II} = \rho_0^I e^{ip} + \rho_0^{II} e^{iq},$$

где

$$\frac{\partial p}{\partial x} = k, \quad \frac{\partial q}{\partial x} = -k, \quad \frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial q}{\partial t} = -\omega.$$

Предполагается, как и выше, что $\rho_{01,02}^{I,II}$ вещественны.

Подставляя (20) в систему уравнений (5)–(8), усредняя и учитывая, что

$$\int_0^{2\pi} e^{inp} dp = 0, \quad \int_0^{2\pi} e^{inq} dq = 0, \quad (n = 1, 2, 3, \dots),$$

легко видеть, что уравнения для всех величин, кроме $\rho_{01,02}^{I,II}$, расцепляются. Для них получим две несвязанные системы уравнений типа (11), (13), (15) и (16), одну – для E_1 , $\rho_{0,1,2,21}^I$, другую – для E_2 , $\rho_{0,1,2,21}^{II}$. При этом уравнения для $\rho_{01,02}^{I,II}$ имеют следующий вид:

$$\frac{\partial \rho_{01}^{I,II}}{\partial t} = -\gamma_1 \rho_{01}^{I,II} + \gamma_{21} \rho_{02}^{I,II} - \frac{i}{2\hbar} (d_{21} E_{01} \rho_0^{I*} - d_{12} E_{01}^* \rho_0^I + d_{21} E_{02} \rho_0^{II*} - d_{12} E_{02}^* \rho_0^{II}), \quad (21)$$

$$\frac{\partial \rho_{02}^{I,II}}{\partial t} = -\gamma_2 \rho_{02}^{I,II} + \frac{i}{2\hbar} (d_{21} E_{01} \rho_0^{I*} - d_{12} E_{01}^* \rho_0^I + d_{21} E_{02} \rho_0^{II*} - d_{12} E_{02}^* \rho_0^{II}). \quad (22)$$

Делая те же приближения, что и в предыдущем параграфе, можно получить связанную систему уравнений для $\rho_{01,02}^{I,II}$ и уравнения типа (17), в которых E_0 заменяется на E_{01} либо E_{02} , а разность $\rho_{01} - \rho_{02}$ – на $\rho_{01}^{I,II} - \rho_{02}^{I,II}$, после чего, считая, как и выше, последние выражения постоянными, можно получить расцепленные уравнения для E_{01} и E_{02} , каждое из которых принимает вид (17) и (19) с вышеуказанными заменами. Таким образом, волны, распространяющиеся навстречу друг другу, в данном приближении не взаимодействуют; связь между ними осуществляется посредством условий на зеркалах.

Решение для узких осесимметричных пучков

Переходя в уравнении (19) к цилиндрическим координатам, будем искать его решение в виде, принятом в теории узких аксиальных пучков:

$$\psi = \frac{a_0}{f(x)} \exp \left\{ -\frac{r^2}{r_0^2 f^2(x)} + i \left[\sigma_1(x) + \frac{r^2}{2R(x)} \right] \right\}, \quad (23)$$

где a_0 и r_0 – амплитуда и радиус пучка при $x=0$, $f(x)$ – безразмерный радиус пучка, $R(x)$ – радиус кривизны фронта волны, $\sigma_1(x)$ – набег фазы на оси пучка, r – радиальная координата.

Подставляя (23) в уравнение (19) и проделав обычные в теории узких пучков расчеты (см., например, [10,11]), можно получить уравнения для функций $f(x)$, $\sigma_1(x)$ и $R(x)$. При этом уравнения для f и R имеют вид (см. также [7,8])

$$\frac{d^2 f}{dx^2} = \frac{M}{f^3} + \frac{\sigma N a_0^2 (\rho_{01} - \rho_{02})}{k f} \zeta_2, \quad (24)$$

$$R(x) = \left[k \frac{df}{f dx} + \frac{a_0^2}{2f^2} \zeta \right]^{-1}, \quad (25)$$

$$M = \frac{4}{k^2 r_0^4} + \frac{4a_0^2}{k^2 r_0^2} \zeta_1 - \frac{a_0^4}{k^2} \zeta_2^2. \quad (26)$$

Уравнения (23)-(26) описывают поведение пучка при учете нелинейной диссипации в среде. В случае $\zeta_2 = 0$ они переходят в известные уравнения недиссипативной нелинейной оптики (см., например, [3]). Известно [3], что на поведение пучка существенно влияет знак величины M . Как видно из (26), даже в том случае, когда нелинейность, связанная с ζ_1 , соответствует дефокусировке ($M > 0$), наличие слагаемого с ζ_2 приводит при достаточно больших амплитудах к самофокусировке ($M < 0$). Рассмотрим более подробно условия образования фокусов и фокальных пятен.

В выражении (26) первое слагаемое описывает дифракцию, второе – нелинейное прохождение, а третье – нелинейное поглощение.

В случае слабой ($\sigma N(\rho_{01} - \rho_{02})x \ll 1$) либо сильной ($\sigma N(\rho_{01} - \rho_{02})x \gg 1$) диссипации экспоненты в коэффициентах $\zeta_{1,2}$ можно считать близкими к единице или к нулю соответственно. В первом случае коэффициенты в (24) можно считать постоянными. Тогда при наличии лишь одного зеркала граничные условия можно задать следующим образом:

$$f = 1, \quad R^{-1}(0) = R_0^{-1}, \quad f'_0 = \frac{df(0)}{dx} = \frac{1}{k} \left(\frac{1}{R_0} - \frac{1}{2} a_0^2 \zeta_2 \right). \quad (27)$$

При выводе условия (27) использовано соотношение (25). Считая величину $k\sigma(\rho_{01} - \rho_{02})\zeta_2$ малой, пренебрежем вторым слагаемым в правой части (24) и запишем решение (24) в виде

$$f^2 = \frac{M}{C} + C \left(x + \frac{f'_0}{C} \right)^2, \quad C = M + f_0'^2. \quad (28)$$

Пусть $R_0 < 0$ (вогнутое зеркало) и $f'_0 < 0$. Тогда при $M > 0$ из (28) следует, что минимальный диаметр пучка (фокальное пятно) будет наблюдаться в точке

$$x_{f_0} = -f'_0 / C. \quad (29)$$

Отметим, что уравнение (24) можно решить, сохраняя оба слагаемых в правой части, но считая коэффициенты не зависящими от x . Тогда первый интеграл уравнения имеет вид [9,10]

$$\frac{1}{2} \left[\left(\frac{df}{dx} \right)^2 - f_0'^2 \right] = -\frac{M}{2f^2} + \frac{M}{2} + \frac{\sigma N a_0^2}{k} (\rho_{01} - \rho_{02}) \ln f. \quad (30)$$

Учитывая, что в фокальном пятне функция f имеет экстремум, можно получить из (30) уравнение для f_{fs} . Итерируя при малых $k\sigma(\rho_{01} - \rho_{02})\zeta_2$, получим [10,11]

$$f_{fs} \cong f_{0fs} \left[1 - \frac{2}{k} \sigma N a_0 f_{0fs}^2 (\rho_{01} - \rho_{02}) \zeta_2 \ln f_{0fs} \right]^{-1/2}, \quad f_{0fs}^{-2} = M^{-1} f_0'^2 + 1. \quad (31)$$

Величина f_{0fs} является решением уравнения (24), в котором отброшен член, содержащий f^{-1} . Из (28) видно, что при $M < 0$ имеется фокус, т.е.

$$f(x_f) = 0, \quad x_f = \frac{\sqrt{-M}}{|C|} - \frac{f_0'}{C} > 0. \quad (32)$$

В случае двух зеркал граничные условия имеют вид

$$x = \mp l, \quad f'_{1,2}(0) = \frac{1}{k} \left[\frac{1}{R_{1,2}(0)} - \frac{1}{2} \zeta_2 a_{01,02} \right], \quad (33)$$

а решение, аналогично (28), запишется как

$$f_{1,2}^2 = \frac{M}{C} + C \left[l \pm x + \frac{f'_{1,2}(0)}{C} \right]^2. \quad (34)$$

При этом формулы (29) и (32) остаются в силе, только перед x_{fs} и x_f следует писать знаки плюс или минус соответственно для прямого и обратного пучков с добавлением длины l .

При $M < 0$ формулы (32) и (33) справедливы до первого фокуса; за этим фокусом решение имеет вид

$$f_{1,2}^2 = \frac{M}{C} + C \left(\pm x \mp x_f + \frac{\sqrt{-M}}{C} \right)^2,$$

а уравнение $\pm x \mp x_f = -2\sqrt{-M}/C$ определяет координаты второго фокуса.

Таким образом, в работе изучено влияние нелинейной диссипации на поведение светового пучка при распространении в нелинейной среде. Показано, в частности, что такое поглощение может существенно менять условия самофокусировки, приводя к тому, что фокусирующая среда будет дефокусирующей и наоборот.

ЛИТЕРАТУРА

1. А.Л.Микаелян, М.Л.Тер-Микаелян, Ю.Г.Турков. Оптические генераторы на твердом теле. М., Сов. радио, 1967.
2. P.L.Kelly. Phys.Rev.Lett., 15, 1005 (1965).
3. С.А.Ахманов, А.П.Сухоруков, Р.В.Хохлов. УФН, 93, 19 (1967).
4. А.Л.Дышко, В.Н.Луговой, А.М.Прохоров. ЖЭТФ, 61, 2305(1971).
5. S.L.McCall and E.L.Nahn. Phys. Rev., 183, 457 (1969).

6. В.М.Арутюнян, Г.Г.Адонц, Д.Г.Акопян, К.В.Арутюнян, в сб. Резонансное взаимодействие электромагнитного излучения с веществом. Ереван, ЕГУ, 1985, с.23.
7. В.Н.Луговой, А.М.Прохоров. УФН, 111, 203 (1973).
8. Г.А.Аскарьян. УФН, 111, 249 (1973).
9. В.С.Бутылкин, А.Е.Каплан, Ю.Г.Хронопуло, Е.И.Якубович. Резонансное взаимодействие света с веществом. М., Наука, 1977.
10. Д.А.Кирсанов, Н.Н.Розанов. Опт. и спектроск., 87, 423 (1989).
11. А.Г.Багдоев, А.В.Шекоян, в сб. Волны и дифракция. М., Наука, 1981, с.317.
12. A.G.Bagdoev and A.V.Shekoyan. Phys. Stat. Solidi (a), 89, 499 (1985).
13. А.Г.Багдоев. Распространение волн в сплошных средах. Ереван, изд. АН Арм. ССР, 1981.
14. J.H.Marburger and F.S.Felber. Phys. Rev. A, 17, 335 (1978).
15. A.G.Bagdoev and A.V.Shekoyan. Int. J. Nonlinear Mech., 32, 385 (1997).
16. С.А.Ахманов, Д.П.Криндич, А.П.Сухоруков, Р.В.Хохлов. Письма в ЖЭТФ, 6, 509 (1967).
17. G.H.Melkumian and A.V.Shekoyan. Phys. Stat. Solidi (a), 48, 23 (1978).

ՃԱՌԱԳԱՅԹՄԱՆ ՏԱՐԱԾՈՒՄԸ ԿԼԱՆՈՂ ԵՐԿՄԱԿԱՐԳԱԿ
ՔԱՌԱԿՈՒՍԱՅԻՆ ՈՉ ԳԾԱՅՆՈՒԹՅԱՄԲ ՄԻՋԱԿԱՅՐՈՒՄ

Ա.Գ. ԲԱԳԴՅԱՆ, Վ.Շ. ՉԱԼՏԻԿՅԱՆ, Ա.Վ. ՇԵԿՈՅԱՆ

Ուսումնասիրված է ինտենսիվ էլեկտրամագնիսական ալիքի տարածումը կլանող, երկմակարդակ միջավայրում: Արտածված է ոչ գծային Շրեդինգերի հավասարումը գծային և ոչ գծային կլանման հաշվառումով: Ստացված են բանաձևեր ֆոկուսի և ֆոկուսային հետքի համար: Ստացված արդյունքները ընդհանրացված են ինտերֆերոմետրի համար:

PROPAGATION OF RADIATION IN DISSIPATIVE TWO-LEVEL QUADRATICALLY NONLINEAR MEDIUM

A.G. BAGDOEV, V.O. CHALTYKYAN, A.V. SHEKOYAN

Propagation of strong electromagnetic wave beam in dissipative two-level media is investigated. The nonlinear Schrödinger equation is derived where either linear or nonlinear dissipation is taken into account. Formulas determining positions of focusses and focal spots are obtained. The results are generalized for the problem of interferometer.

УДК 538.662

КРИТИЧЕСКИЕ ПОКАЗАТЕЛИ ФЕРРОМАГНИТНОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В СИЛЬНО РАЗУПОРЯДОЧЕННЫХ f-ЭЛЕКТРОННЫХ СПЛАВАХ

[Gd_x(Y_{0.85}La_{0.15})_{1-x}][Zn_{0.15}Cd_{0.85}], 0.22 ≤ x ≤ 1

В.Е. АДАМЯН^{1,2}, С.А. МНАЦАКАНЯН^{1,2}, Э.Г. ШАРОЯН^{2,1}

¹Ереванский государственный университет

²Институт физических исследований НАН Армении

(Поступила в редакцию 17 мая 2001 г.)

Исследованы ферромагнитные фазовые переходы в сильно разупорядоченных *f*-электронных системах [Gd_x(Y_{0.85}La_{0.15})_{1-x}][Zn_{0.15}Cd_{0.85}], 0.22 ≤ x ≤ 1, являющихся псевдобинарными металлическими сплавами с кристаллической структурой CsCl. Определены температура фазового перехода T_c и критические показатели спонтанной намагниченности, начальной магнитной проницаемости и критической изотермы намагниченности (β , γ и δ соответственно) при разных значениях концентрации магнитных ионов Gd³⁺. Обнаружено изменение критических показателей в зависимости от x : с ростом пространственных флуктуаций обменных интегралов, обусловленных беспорядком замещения ионов как в редкоземельной, так и в нередкоземельной подрешетках, значения критических показателей стремятся к величинам, получаемым из классических моделей среднего поля: $\gamma = 1$, $\beta = 1/2$ и $\delta = 3$.

1. Введение

Фазовые переходы второго рода и критические явления – предмет многочисленных теоретических и экспериментальных исследований [1-3]. При температурах, достаточно близких к критической, поведение термодинамических функций часто хорошо описывается асимптотическими степенными выражениями, которые зависят от ряда критических показателей. Для магнитных систем, в непосредственной близости к температуре фазового перехода ферромагнетик-парамагнетик (ФМ-ПМ), известны следующие важные асимптотические выражения:

$$\begin{aligned}
 M_s &\sim (T_c - T)^\beta \quad \text{при } T \leq T_c \text{ и } H \rightarrow 0, \\
 \chi_0^{-1} &\sim (T_c - T)^\gamma \quad \text{при } T \geq T_c \text{ и } H \rightarrow 0, \\
 M &\sim H^{1/\delta} \quad \text{при } T = T_c,
 \end{aligned}
 \tag{1}$$

где T_c – температура Кюри, M_s – спонтанная намагниченность, M – намагниченность во внешнем поле H , χ_0 – начальная магнитная восприимчивость, β , γ и δ – критические показатели.

Значения критических показателей магнитных систем зависят от ряда факторов – прежде всего от эффективных обменных взаимодействий (близкодействующих или дальнедействующих), от наличия примесей или дефектов, от степени структурного и/или композиционного беспорядка, от степени термического отжига и т.п. [2,4-8]. Если для случая близкодействующих обменных взаимодействий получено хорошее соответствие между теоретическими расчетами и экспериментом для ряда простых систем (например, Fe и Ni [9,10]), то для магнитных, сильно упорядоченных сплавов с дальнедействующим обменным взаимодействием критическое поведение магнитного фазового перехода исследовано недостаточно: экспериментальные данные противоречивы и нет соответствующих теоретических расчетов.

Интерметаллические соединения редкоземельных элементов (R) с немагнитными металлами (M) первых трех групп периодической таблицы являются удобными модельными системами для исследования магнетизма локализованных магнитных моментов в металлической матрице [11]. Одним из интересных классов этих соединений являются бинарные (RM) и псевдобинарные ($[R_{1-x}R_2]_x[M_{1-y}M_2]_y$) соединения со стехиометрией 1:1, которые имеют кристаллическую структуру типа CsCl (две вставленные друг в друга простые кубические подрешетки, состоящие из R и M ионов и сдвинутые друг относительно друга на половину пространственной диагонали куба).

В настоящей работе проведено исследование зависимости критических магнитных показателей β , γ и δ от концентрации магнитных ионов в псевдобинарных металлических ферромагнитных сплавах $[Gd_x(Y_{0.85}La_{0.15})_{1-x}][Zn_{0.15}Cd_{0.85}]$, с $0.22 \leq x \leq 1$, имеющих кристаллическую структуру типа CsCl. Ферромагнитное упорядочение сплавов $[Gd_x(Y_{0.85}La_{0.15})_{1-x}][Zn_{0.15}Cd_{0.85}]$ обусловлено осциллирующим с расстоянием косвенным обменным взаимодействием спинов ионов Gd^{3+} ($S=7/2$) через электроны проводимости – взаимодействие Рудермана-Киттеля (РККИ-обмен [12]). Состав компонент сплавов выбран таким образом, чтобы параметры, которые сильно влияют на РККИ-взаимодействие (постоянная решетки и концентрация электронов проводимости), не менялись с изменением x , т.е. по мере замещения магнитных ионов Gd^{3+} диамагнитными ионами редкоземельных элементов Y^{3+} и La^{3+} [13,14].

При магнитном разбавлении, из-за случайного характера замещения магнитных ионов немагнитными, вводится магнитный беспорядок в редкоземельной подрешетке. Сплавление приводит также к беспорядку замещения немагнитных ионов. Даже при значении $x = 1$ в сплаве $Gd[Zn_{0.15}Cd_{0.85}]$ есть значительный композиционный беспорядок в неред-

коземельной подрешетке. Как магнитный, так и немагнитный беспорядок обуславливают флуктуации обменных интегралов и влияют на магнитные свойства кристаллов. В частности, это относится к влиянию на значения критических показателей фазовых переходов ФМ-ПМ. Таким образом, исследование сплавов $[Gd_x(Y_{0.35}La_{0.15})_{1-x}][Zn_{0.15}Cd_{0.85}]$, $0.22 \leq x \leq 1$, в зависимости от x , позволяет надеяться, что можно проследить влияние как немагнитного, так и магнитного композиционного беспорядков на фазовый переход ФМ-ПМ в широком интервале концентраций Gd^{3+} : от $x=1$ до значений, близких к порогу перколяции. Отметим, что в [15] при атомной концентрации Gd^{3+} , равной 0.22, мы наблюдали интересные магнитные аномалии, индуцированные композиционным беспорядком только немагнитных ионов, в родственных металлических сплавах $[Gd_{0.22}(La_{1-x}Y_x)_{0.78}][Zn_{1-x}Cd_x]$, где $0 \leq x \leq 1$. Эти аномалии были интерпретированы с учетом эффектов сплавления — зависимостью средней длины пробега электронов и эффективной массы электронов от x [15].

2. Экспериментальные результаты и обсуждение

Для определения зависимости критических показателей фазовых переходов от концентрации магнитных ионов, нами было проведено исследование температурной зависимости намагниченности ферромагнитных сплавов $[Gd_x(Y_{0.85}La_{0.15})_{1-x}][Zn_{0.15}Cd_{0.85}]$ при различных значениях концентрации магнитных ионов гадолиния Gd^{3+} : $0.22 \leq x \leq 1$.

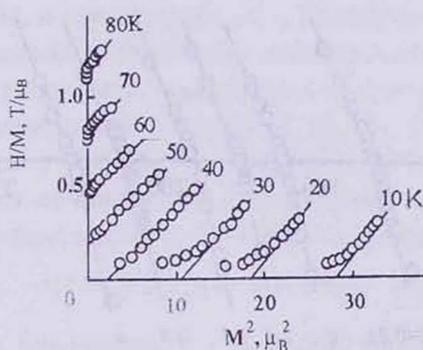


Рис.1. Изотермы кривых намагничивания (зависимости M^2 от H/M) образца $Gd_{0.22}[Zn_{0.15}Cd_{0.85}]$.

Для определения значений спонтанной намагниченности M_s и обратной начальной восприимчивости χ_0^{-1} нами был применен метод термодинамических коэффициентов [16-18]. Значения намагниченности образца и приложенного магнитного поля для различных температур были отложены в системе координат $H/M = f(M^2)$. По пересечению продолжений полученных прямых с осью ординат (при $T > T_c$) и осью абсцисс (при $T < T_c$) определяли величины χ_0^{-1} и M_s , соответственно. Изотерма, соот-

ветствующая точке Кюри, проходит через начало координат. На рис.1 приведены изотермы зависимости H/M от M^2 для образца с $x = 0,22$ при разных температурах.

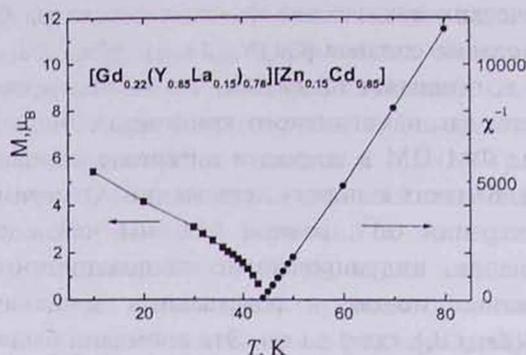


Рис.2. Температурная зависимость намагниченности и обратной начальной восприимчивости образца $Gd_{0,22}[Zn_{0,15}Cd_{0,85}]$.

Температурная зависимость спонтанной намагниченности M_s и обратной начальной восприимчивости χ_0^{-1} для того же образца с $x = 0,22$ приведены на рис.2. Кривые, аналогичные тем, которые приведены на рис.1 и 2, были построены для всех образцов исследованной системы.

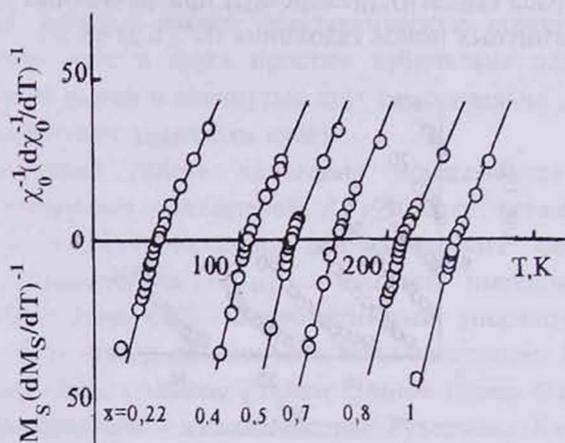


Рис.3. Построение Кювеля-Фишера для определения точек Кюри и коэффициентов β и γ образцов $[Gd_x(Y_{0,85}La_{0,15})_{1-x}][Zn_{0,15}Cd_{0,85}]$ с $x = 1,0, 0,8, 0,7, 0,5, 0,4$ и $0,22$.

Для более точного определения значений T_c и для определения критических показателей β и γ , для каждого значения x мы пользовались построением Кювеля-Фишера [19]. Для этого были построены зависимости

$$\chi_0^{-1}(d\chi_0^{-1}/dT)^{-1} = (T - T_c)/\gamma, \quad (2)$$

$$M_s (dM_s / dT)^{-1} = (T - T_c) / \beta \quad (3)$$

от температуры, которые при температурах, приближающихся к точке Кюри, ложатся на прямую линию, как это видно на рис.3. Эти прямые пересекают ось температур в точке Кюри, а из их наклонов нетрудно определить значения β и γ . Значения температур Кюри и показателей β и γ , определенные методом наименьших квадратов, приведены в таблице.

Таблица 1. Ферромагнитные точки Кюри и критические показатели сплавов $[\text{Gd}_x(\text{Y}_{0.85}\text{La}_{0.15})_{1-x}][\text{Zn}_{0.15}\text{Cd}_{0.85}]$. Сравнение с Gd [20] и с теорией среднего поля [1-3].

x	Δ	T_c, K	γ	β	δ	δ_p	α
1.0	0.30	245.4	1.20	0.53	3.13	3.26	-0.20
0.9	0.30	210.4	1.18	0.54	3.09	3.18	-0.20
0.7	0.30	163.1	1.25	0.53	3.18	3.35	-0.22
0.5	0.40	135.2	1.20	0.54	3.02	3.22	-0.17
0.4	0.50	106.8	1.03	0.52	2.94	2.98	-0.05
0.22	0.70	43.7	1.07	0.51	2.98	3.10	-0.03
Gd	?	289	1.19	0.38	3.61	-	0.06
Mean field	0	-	1.0	0.5	3.0	-	0.0

В первой колонке таблицы представлены концентрации x исследованных образцов $[\text{Gd}_x(\text{Y}_{0.85}\text{La}_{0.15})_{1-x}][\text{Zn}_{0.15}\text{Cd}_{0.85}]$. Во второй колонке приведены значения Δ , характеризующие пространственные флуктуации обменных интегралов, в зависимости от x . Величина $\Delta = \Delta/J_0$, где J_0 - среднее значение обменной энергии, ΔJ - стандартное отклонение. Значения Δ нами оценены из анализа температурной зависимости относительной спонтанной намагниченности $\sigma(T) = M_s(T)/M_0$ (M_0 - спонтанная намагниченность при $T=0\text{K}$) от относительной температуры T/T_c (рис.4). Для определения Δ использовано соотношение, полученное Хандрихом в модели молекулярного поля для аморфных ферромагнетиков [21]:

$$\sigma(T) = 1/2 \{ B_s[(1+\Delta)y] + B_s[(1-\Delta)y] \} \quad (4)$$

где B_s - функция Бриллюэна, $y = [3\sigma(T)S/(S+1)]T_c/T$. На рис.4 сплошные линии соответствуют формуле (4) с $S = 7/2$ и $\Delta = 0.3$ и 0.7 . Видно, что с ростом Δ температурная зависимость приведенной спонтанной намагниченности становится все менее и менее выпуклой. Экспериментальные точки соответствуют образцам с $x = 1$ и 0.22 . Для образца $\text{Gd}[\text{Zn}_{0.15}\text{Cd}_{0.85}]$ $\Delta \approx 0.3$. Следовательно, даже при $x = 1$ случайный беспорядок замещения ионов Zn и Cd в редкоземельной подрешетке вызывает заметные изменения в распределении обменных взаимодействий ионов Gd^{3+} . Интересно отметить, что даже в случае чистого металлического Gd температурная зависимость относительной намагниченности σ не полностью совпадает с функцией Бриллюэна с $\Delta = 0$ [1].

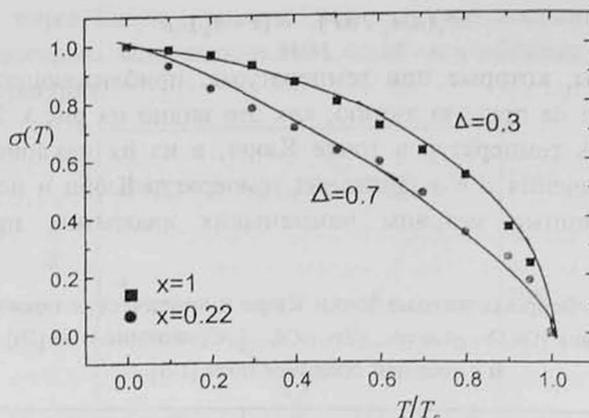


Рис.4. Зависимости относительной спонтанной намагниченности $\sigma(T)$ от относительной температуры T/T_c для образцов $[\text{Gd}_x(\text{Y}_{0.85}\text{La}_{0.15})_{1-x}][\text{Zn}_{0.15}\text{Cd}_{0.85}]$ с $x = 1,0$ и $0,22$ и их сравнение с формулой (4) при $\Delta = 0,3$ и $0,7$ соответственно.

В следующем столбце таблицы приведены значения критического показателя δ , которые определены из критических изотерм для $T=T_c$, построением зависимостей M от H в двойном логарифмическом масштабе (см. рис.5). Из наклонов прямых для каждого значения x определены δ . Точка Кюри и критические показатели для образца, например, с концентрацией магнитных ионов гадолиния, равной $0,22$, имеют следующие значения:

$$T_c = 43.7 \pm 0.2; \quad \gamma = 1.07 \pm 0.04; \quad \beta = 0.51 \pm 0.02 \quad \text{и} \quad \delta = 2.98 \pm 0.07.$$

Ошибки в определении T_c и критических показателей для образцов с другими концентрациями x имеют величину того же порядка, что и для $x = 0.22$.

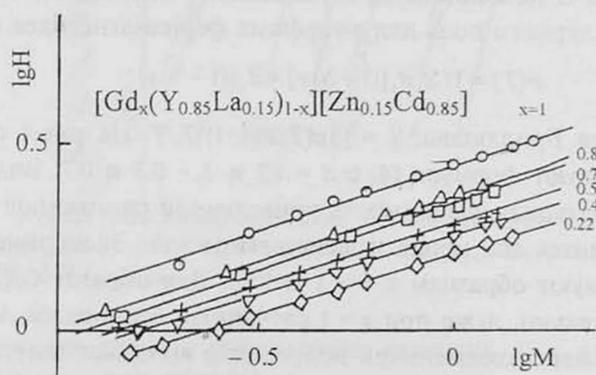


Рис.5. Критические изотермы намагниченности образцов $[\text{Gd}_x(\text{Y}_{0.85}\text{La}_{0.15})_{1-x}][\text{Zn}_{0.15}\text{Cd}_{0.85}]$ с $x = 1,0, 0,8, 0,7, 0,5, 0,4$ и $0,22$ для определения критического показателя δ .

Значения T_c и критические показатели, определенные нами методом Кювеля-Фишера, совпадают со значениями, полученными из соотношений, основанных на гипотезе масштабной инвариантности, или скейлинга. Согласно гипотезе скейлинга, зависимости приведенного магнитного поля $h = H/|T/T_c - 1|^{\beta+\gamma}$ от приведенной намагниченности $m = M/|T/T_c - 1|^\beta$, при правильном выборе T_c и критических показателей, ложатся на две ветви кривых $h = f_{\pm}(m)$, где индексы "+" и "-" относятся к области температур выше или ниже точки Кюри. На рис.6 приведена зависимость h от m для образца с $x = 0,22$. Кривая слева относится к парамагнитной области, кривая справа – к ферромагнитной. В непосредственной близости к точке Кюри обе кривые совпадают. Аналогичные кривые были построены для других значений концентрации x . Критические показатели, полученные методом скейлинга, в пределах ошибок эксперимента совпадают с результатами, полученными из анализа кривых рис.3.

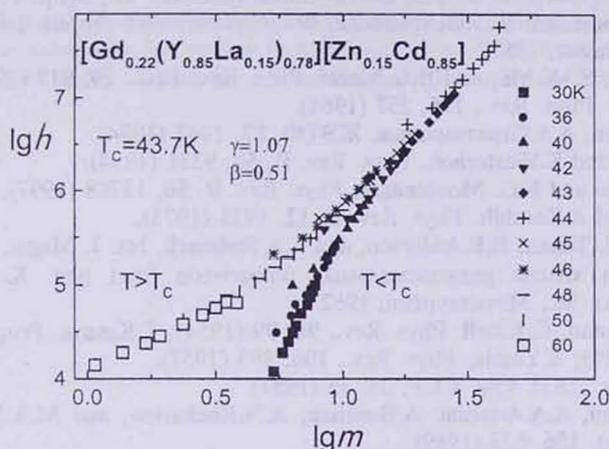


Рис.6. Зависимость приведенной намагниченности $m = M/|T/T_c - 1|^\beta$ от приведенного магнитного поля $h = H/|T/T_c - 1|^{\beta+\gamma}$ для образца $[\text{Gd}_{0.22}(\text{Y}_{0.85}\text{La}_{0.15})_{0.78}][\text{Zn}_{0.15}\text{Cd}_{0.85}]$.

Известно, что, согласно гипотезе скейлинга, существует ряд равенств между критическими показателями и что, зная два показателя, можно определить все остальные [1-3]. Из соотношений

$$\gamma = \beta(\delta - 1), \quad (5)$$

$$\alpha + \beta(\delta + 1) = 2 \quad (6)$$

нами вычислены δ_p – расчетное значение для критической изотермы и α – критический показатель для теплоемкости, которая пропорциональна $(T - T_c)^\alpha$. Эти значения приведены в последних двух колонках таблицы. С учетом ошибок измерений видно неплохое совпадение δ_p , рассчитанного по γ и β , с экспериментально полученными значениями δ .

В таблице, кроме указанных критических показателей сплавов $[Gd_x(Y_{0.85}La_{0.15})_{1-x}][Zn_{0.15}Cd_{0.85}]$, $0.22 \leq x \leq 1$, приведены литературные данные для металлического Gd и теоретические расчеты в приближении среднего поля. Как видно из таблицы, с уменьшением x флуктуации обменных интегралов Δ растут, а критические показатели β , γ и δ приближаются к значениям 0.5, 1.0 и 3, т.е. к величинам, которые получаются в классических моделях среднего поля (теории Ландау, Вейсса). В [22] теоретически рассмотрен классический гейзенберговский ферромагнетик с флуктуациями обменных взаимодействий в кластерном приближении Бете-Пайерлса-Вейсса и для критических показателей неупорядоченных ферромагнетиков также получены обычные значения теории молекулярного поля: $\beta=1/2$ и $\gamma=1$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Г.Стенли. Фазовые переходы и критические явления. М., Мир, 1973.
2. Ш.Ма. Современная теория критических явлений. М., Мир, 1980.
3. А.З.Паташинский, В.Л.Покровский. Флуктуационная теория фазовых переходов. М., Наука, 1982.
4. М.Е.Fisher, S.-К.Ма, and B.G.Nickel, Phys. Rev. Lett., 29, 917 (1972).
5. М.Е.Fisher. Phys. Rev., 176, 257 (1968).
6. А.А.Собянин, А.А.Стратонников. ЖЭТФ, 87, 1442 (1984)
7. O.Voxberg and K.Westerholt. Phys. Rev. B, 50, 9331 (1994).
8. N.O.Moreno and F.C. Montenegro. Phys. Rev. B, 56, 13708 (1997).
9. G.Ahlers and A.Kornblit. Phys. Rev. B, 12, 1938 (1975).
10. A.Arajs, V.L.Tehan, E.E.Anderson, and A.A.Stelmach. Int. J. Magn., 1, 41 (1970).
11. Физика и химия редкоземельных элементов (под ред. К. Гшнайдера и Л. Айринга). М., Металлургия, 1982.
12. М.А.Ruderman, С.Кittell. Phys. Rev., 96, 99 (1954); Т.Касуя. Prog. Theor. Phys., 16, 45 (1956); К.Yosida. Phys. Rev., 106, 893 (1957).
13. В.Е.Адамян. ДАН Арм. ССР, 35, 35 (1987).
14. V.E.Adamian, A.A.Artsruni, A.Benaissa, A.N.Kocharian, and M.A.Melikian. Phys. Stat. Sol.(b), 156, 633 (1989).
15. В.Е.Адамян, Э.Г.Шароян. Известия НАН Армении, Физика, 36, 94 (2001).
16. К.П.Белов, Л.Н.Горяга. ФММ, 2, 441 (1956).
17. К.П.Белов. Магнитные превращения. М., Наука, 1959.
18. A.Arrott. Phys. Rev., 108, 1394 (1957).
19. J.S.Kouvel and M.E.Ficher. Phys. Rev., 136A, 1626 (1964).
20. M.N.Oeschizeauch, G.Develey. J. de Physique, 32, 319 (1971).
21. К.Хандрих, С.Кобе. Аморфные ферро- и антиферромагнетики. М., Мир, 1982.
22. К.Moorjani, S.K.Gatak. J. Phys. C, 10, 1027 (1977).

ՖԵՆՈՍԱԳՆԻՍԱԿԱՆ ՓՈՒԼԱՅԻՆ ԱՆՑՄԱՆ ԿՐԻՏԻԿԱԿԱՆ
ՑՈՒՑԱՆԻՇՆԵՐՆ ԱՊԱԿԱՐԳԱՎՈՐՎԱԾ ԲԷԼԵԿՏՐՈՆԱՅԻՆ
ՀԱՄԱՁՈՒԼՎԱԾՔՆԵՐՈՒՄ $[Gd_x(Y_{0.85}La_{0.15})_{1-x}][Zn_{0.15}Cd_{0.85}]$, $0.22 \leq x \leq 1$

Վ.Ե. ԱՂԱՄՅԱՆ, Ս.Ա. ՄՆԱՑԱԿԱՆՅԱՆ, Է.Գ. ՇԱՌՈՅԱՆ

Հետազոտված են ֆենոմագնիսական փուլային անցումները ուժեղ ապակարգավորված $[Gd_x(Y_{0.85}La_{0.15})_{1-x}][Zn_{0.15}Cd_{0.85}]$, $0.22 \leq x \leq 1$, համակարգերում, որոնք հանդիսանում են

CsCl բյուրեղային կառուցվածքով պսեվդոբինար մետաղական համաձուլվածքներ: Որոշված են փուլային անցման սպոնտան մագնիսացման, սկզբնական մագնիսական թափանցելիության և մագնիսացման իզոթերմի կրիտիկական (β , γ , և δ համապատասխանաբար) ցուցանիշները Gd^{3+} իոնների տարրեր կոնցենտրացիաների դեպքում: Հայտնաբերված է, որ փոխանակային ինտեգրալների տարածական ֆլուկտուացիաների աճը, որը պայմանավորված է իոնների տեղակայման անկարգությամբ, ինչպես հազվագյուտ հողային, այնպես էլ մետաղական ենթացանցերում, հանգեցնում է կրիտիկական ցուցանիշների մոտեցմանը միջին դաշտի դասական մոդելից ստացվող արժեքներին:

CRITICAL EXPONENTS OF THE FERROMAGNETIC PHASE TRANSITION IN HIGHLY DISORDERED f-ELECTRON ALLOYS:

$$[Gd_x(Y_{0.85}La_{0.15})_{1-x}][Zn_{0.15}Cd_{0.85}], 0.22 \leq x \leq 1$$

V.E. ADAMIAN, S.A. MNATSAKANYAN, E.G. SHAROYAN

Ferromagnetic phase transitions are studied in highly disordered f-electron systems $[Gd_x(Y_{0.85}La_{0.15})_{1-x}][Zn_{0.15}Cd_{0.85}], 0.22 \leq x \leq 1$, which represent the pseudo-binary metallic solutions with CsCl crystal structure. The temperature of phase transitions, T_C , critical exponents of magnetization, initial magnetic susceptibility, and critical isotherms of magnetization (β , γ and δ) are determined for different concentrations of Gd^{3+} ions. The changes of critical exponents are studied as a function of x. These exponents tend to the classical values of $\gamma = 1$, $\beta = 1/2$, and $\delta = 3$ while the space fluctuations of exchange integrals increase.

УДК 621.382

РЕНТГЕНОДИФРАКЦИОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЛИЯНИЯ ФТОРИРОВАНИЯ НА СТРУКТУРУ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО SrTiO_3

Е.Г. ЗАРГАРЯН, В.С. АРУТЮНЯН, А.Г. САРКИСЯН,
А.П. АЙВАЗЯН, К.Г. БЕГОЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 15 февраля 2001 г.)

Проведены рентгенодифракционные исследования структурных параметров поликристаллических образцов SrTiO_3 с различным содержанием примеси фтора. Определены средние размеры кристаллитов, средняя деформация в них, а также дисперсии по размерам и деформациям. Рассмотрено влияние процентного содержания фтора на морфологию SrTiO_3 .

Введение

В последние годы большую актуальность приобрели исследования фотоэлектродов на основе SrTiO_3 [1-2]. Перспектива использования фотоэлектродов на основе SrTiO_3 в качестве катализаторов процесса фотоэлектролиза воды обусловлена высоким квантовым выходом, стабильностью в водных растворах электролитов, а также отрицательной величиной потенциала плоской зоны, достаточной для использования электродов на основе SrTiO_3 без внешнего смещения даже в гомогенной фотоэлектрохимической ячейке. Широкая запрещенная зона SrTiO_3 является основным, ограничивающим эффективностью, фактором. Поэтому основное направление исследований фотоэлектродов на основе SrTiO_3 связано с выявлением возможности распространения области fotocувствительности в сторону длинноволновой части спектра. Спектральные характеристики таких материалов существенно зависят от рода и концентрации легирующих добавок и от технологических режимов легирования. Характеристики фотоэлектродов существенно зависят также от структурных изменений, вызванных легированием и термообработкой SrTiO_3 .

Данная работа посвящена рентгенодифракционному исследованию структурных параметров фторированного SrTiO_3 . Интерес к такому объекту исследований вызван тем, что фторирование предположительно может привести к уменьшению эффективной запрещенной зоны полупроводникового фотоэлектрода.

Эксперимент

Синтез полупроводниковых, частично восстановленных и фторированных образцов на основе SrTiO_3 проводился в шахтной вакуумной электропечи сопротивления СШВ1-2,5. Спрессованные брикеты из порошка исходного SrTiO_3 , а также брикеты из перемешанных в соответствующих соотношениях исходных компонент (SrTiO_3 и SrF_2) подвергались термообработке в среде инертного газа (гелий). Синтез проводился при 1300°C . Таким образом нами были получены и исследованы следующие образцы: исходный образец из спрессованного порошка SrTiO_3 (обр. No.1), частично восстановленный образец SrTiO_{3-x} (обр. No.2), синтезированные образцы, содержащие в шихте 0,5 ат. % F (обр. No.3), 1 ат. % F (обр. No.4), 5 ат. % F (обр. No.5).

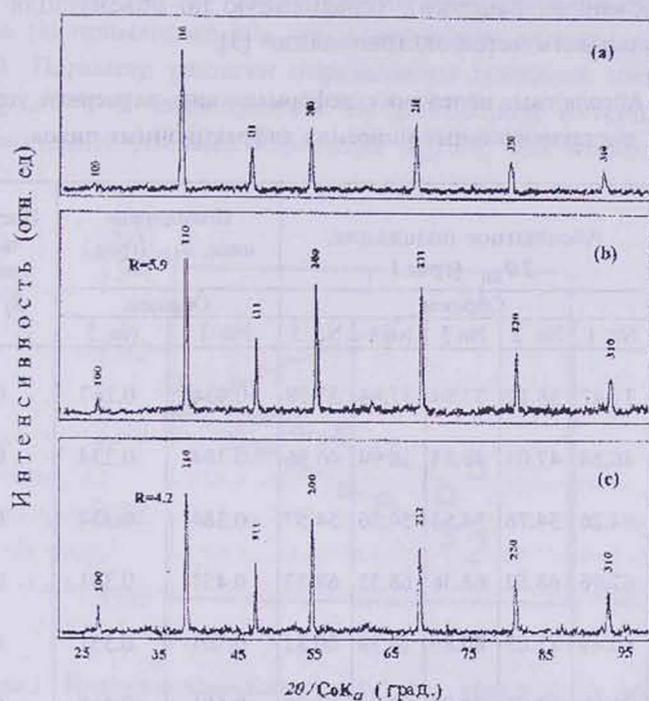


Рис.1. Рентгеновские дифрактограммы: а) – исходный образец, б) – исходный образец после отжига, в) – образец с 5 ат. % F (параметр R указывает отношение максимумов интенсивностей дифракционных пиков (110) и (111)).

Рентгенографические измерения постоянной решетки, средней деформации, среднего размера когерентного домена и функций распределения когерентных доменов по деформациям и линейным размерам были проведены в режиме $\theta - 2\theta$ по симметричной схеме Брэгга-Брентано с использованием обычного порошкового дифрактометра ДРОН-2. В качестве примера на рис.1 приведены дифрактограммы для исходного

образца (а), для образца после отжига (б) и фторирования с 5 ат.% фтора (с). Для улучшения качества дифрактограмм рентгеновское излучение CoK_{α} предварительно монохроматизировалось графитовым монохроматором. Для исключения инструментальных aberrаций были сняты дифрактограммы от эталонного образца (см. табл.1), и полученные уширения вычитались из уширения соответствующих пиков исследуемых образцов. При обработке дифрактограмм учитывалось, что каждый пик является наложением линий $\text{CoK}_{\alpha 1} - \lambda = 1,78892 \text{ \AA}$ и $\text{CoK}_{\alpha 2} - \lambda = 1,79278 \text{ \AA}$.

Определение среднего значения параметра кристаллической решетки

Как известно, измерение абсолютных положений дифракционных пиков дает возможность определить постоянную решетки поликристаллической структуры (и деформации при известной постоянной недеформированной решетки), усредненную по объему. Для этой цели можно использовать метод экстраполяции [3].

Таблица 1. Абсолютные положения, деформационно-размерные уширения и инструментальные уширения дифракционных пиков.

Отражение	Абсолютное положение, $2\theta_{hkl}$ (град.)					Полуширина пика, B_{hkl} (град.)		Инструментальное уширение, B_i (град.)
	Образец					Образец		
	No. 1	No. 2	No.3	No.4	No. 5	No. 1	No. 5	
110	37.47	38.12	37.84	37.84	37.99	0.434	0.267	0.197
111	46.54	47.01	46.84	46.94	46.86	0.384	0.234	0.197
200	54.26	54.78	54.54	54.56	54.57	0.384	0.334	0.210
211	67.96	68.52	68.36	68.33	68.33	0.451	0.351	0.210
220	80.49	81.03	80.85	80.89	80.81	0.501	0.351	0.221
310	92.60	93.05	92.95	92.90	92.85	0.501	0.418	0.229

Он заключается в том, что постоянная решетки определяется из построения серии точек $\{p_{hkl}, a^{(hkl)}\}$ для зарегистрированных на спектре дифракционных пиков. Параметры p_{hkl} и $a^{(hkl)}$ задаются как

$$p_{hkl} = \frac{\cos^2 \theta_{hkl}}{\sin \theta_{hkl}}, \quad (1)$$

$$a^{(hkl)} = \frac{\lambda \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}{2 \sin \theta_{hkl}} \quad (2)$$

и связаны соотношением

$$a^{(hkl)} = -\frac{D_a}{r} p_{hkl} + a. \quad (3)$$

В (1)-(3) θ_{hkl} – абсолютное угловое положение дифракционного пика hkl по θ -шкале, λ – длина волны рентгеновского излучения (обычно это длина волны $K\alpha_1$ линии), D – возможное смещение образца по отношению к оси гониометра в экваториальной плоскости, r – расстояние образец-детектор, p_{hkl} – угловой параметр, $a^{(hkl)}$ – значение постоянной решетки, определенное в соответствии с (2) для углового положения дифракционного пика hkl , a – определяемое значение параметра решетки. Выражение (2) применимо для кристаллической решетки с кубической структурой. Параметр решетки определяется линейной интерполяцией точек $\{p_{hkl}, a^{(hkl)}\}$ и последующей экстраполяцией интерполяционной линии к значению углового параметра $p_{hkl} = 0$, для которого $a^{(hkl)} = a$ [см.(3)].

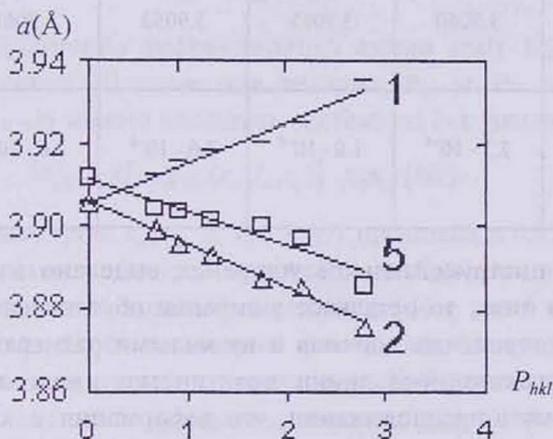


Рис.2. Интерполяционные прямые для определения параметров решетки образцов No.1, No.2 и No.5 в методе экстраполяции.

Серия дифракционных пиков на $\theta - 2\theta$ рентгеновских спектрах (рис.1) соответствует кубической структуре кристаллической решетки поликристаллических образцов $SrTiO_3$. Для анализа спектров из дифракционных пиков методом Решингера была предварительно выделена линия $K\alpha_1$. Данные об абсолютных угловых положениях дифракционных пиков $K\alpha_1$ (110), (111), (200), (211), (220) и (310) приведены в табл.1. На основе полученных данных вышеописанным экстраполяционным методом была определена постоянная решетки в образцах. Дифракционный пик

(100) из-за нечеткой формы не был включен в анализ. На рис.2 представлены интерполяционные прямые для 1-го, 2-го и 5-го образцов. Найденные значения параметров решетки для всех образцов приведены в табл.2. Точность измерения параметра кристаллической решетки порядка 0.0001 Å.

Определение функций распределения по деформациям и размерам

После того, как определена постоянная решетки, средняя остаточная деформация в образцах определяется выражением

$$\varepsilon_a = \frac{a - a_0}{a_0}, \quad (4)$$

где $a_0 = 3.9051 \text{ \AA}$ – параметр неискаженной кристаллической решетки SrTiO_3 . Полученные значения для средней деформации решетки приведены в таблице 2.

Таблица 2

Образец	No. 1	No. 2	No. 3	No. 4	No. 5
Параметр решетки a (Å)	3.9060	3.9055	3.9052	3.9061	3.9115
Средняя деформация ε_a	$2.3 \cdot 10^{-4}$	$1.0 \cdot 10^{-4}$	$2.6 \cdot 10^{-5}$	$2.6 \cdot 10^{-4}$	$1.6 \cdot 10^{-3}$

Если инструментальное уширение выделено из уширения дифракционного пика, то остальное уширение обусловлено дисперсией деформаций когерентных доменов и их малыми размерами. Все выделенные $K\alpha_1$ дифракционные линии практически имели гауссовский профиль. Поэтому в предположении, что деформация ε каждого когерентного домена однородна, распределения доменов по деформациям и линейным размерам могут быть представлены в виде

$$f(\varepsilon) = \left(1/\sqrt{2\pi}\varepsilon_d\right) \exp\left[-(\varepsilon - \varepsilon_a)^2 / (2\varepsilon_d^2)\right], \quad (5)$$

$$f(l) = \left(1/\sqrt{2\pi}l_d\right) \exp\left[-(l - l_a)^2 / (2l_d^2)\right], \quad (6)$$

где

$$\varepsilon_d = \left(\langle(\varepsilon - \varepsilon_a)^2\rangle\right)^{1/2} \text{ и } l_d = \left(\langle(l - l_a)^2\rangle\right)^{1/2}.$$

В (5) ε – деформация когерентного домена, ε_a и ε_d – средняя деформация (макродеформация) и параметр, характеризующий диспер-

сию деформации в поликристаллической структуре. В (6) l , l_a и l_d – характерный линейный размер когерентного домена (субзерна), среднее значение и параметр дисперсии этой величины. В нашей работе [4] для уширения дифракционного пика (в случае гауссовских распределений), обусловленного дисперсией деформации и малыми размерами доменов, было получено следующее выражение:

$$b_{hkl}^2 = [(32 \ln 2) \operatorname{tg}^2 \theta_{hkl} \varepsilon_d^2 + (4\pi^{-1} \ln 2) (\lambda / (\cos \theta_{hkl} l_a))^2] \times [1 - kl_d^2 (2d_{hkl}^{-2} \varepsilon_d^2 + \pi^{-1} l_a^{-2})] \equiv g_{hkl}(\varepsilon_d, l_a, l_d), \quad (7)$$

где b_{hkl} – угловая полуширина дифракционного пика, λ – длина волны рентгеновского излучения (в нашем случае – это длина волны K_{α_1} линии), d_{hkl} – межплоскостное расстояние атомных плоскостей (hkl), $k = 23,67$ – постоянная величина, g_{hkl} – вспомогательное обозначение, выражающее функциональную зависимость; остальные параметры были введены в (5) и (6). Зарегистрированные рентгеновские инструментальные кривые практически также имели гауссовский профиль, поэтому справедливо следующее условие [3]:

$$b_{hkl}^2 = B_{hkl}^2 - B_i^2, \quad (8)$$

где B_{hkl} и B_i – полуширины дифракционной линии (hkl) K_{α_1} и ее инструментальной кривой. Данные для величин B_{hkl} и B_i приведены в таблице 1. Из (7) и (8) можно составить систему из 3-х уравнений

$$\{B_{hkl}^2 - B_i^2 = g_{hkl}(\varepsilon_d, l_a, l_d)\} \text{ для } \{hkl\} \quad (9)$$

относительно параметров ε_d , l_a и l_d . В (9) предполагается, что $\{hkl\}$ – это комбинация каких-либо трех отражений, выбранных из множества зарегистрированных на дифракционном спектре (см. рис.1 и таблицу 1). Система уравнений (9) была решена для всевозможных комбинаций $\{hkl\}$ с использованием соответствующих значений параметров B_{hkl} и B_i из таблицы 1. В таблице 3 приведены значения усредненных решений для ε_d , l_a и l_d . Для решения системы (9) была использована компьютерная программа "Математика-3" [5].

Таблица 3

Образец	Дисперсия деформации ε_d	Средний размер когерентного домена, l_a (μm)	Дисперсия размера домена, l_d (μm)
№. 1	$2.5 \cdot 10^{-3}$	0.044	0.0050
№. 5	$2.0 \cdot 10^{-3}$	0.096	0.0074

Для сравнительного анализа распределения $f(\varepsilon)$ и $f(l)$, полученные на основе данных табл.2, представлены на рис.3.

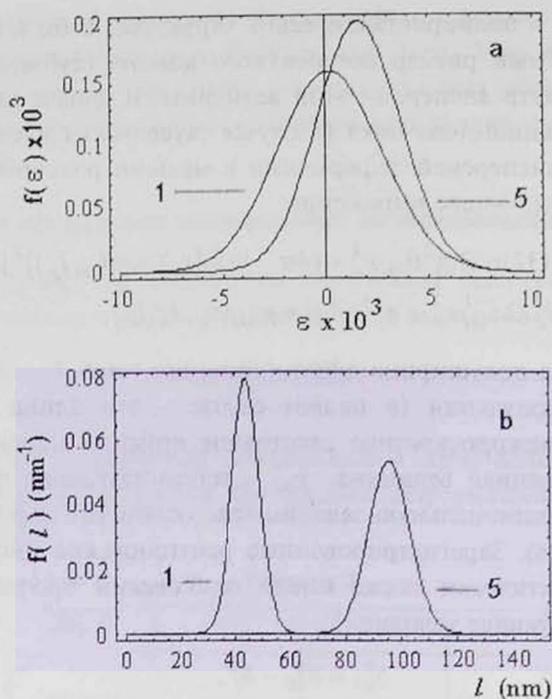


Рис.3. Распределения когерентных доменов по деформациям (а) и размерам (б) в образцах No.1 и No.5.

Обсуждение полученных результатов

Из проведенных исследований можно сделать вывод, что частичное восстановление SrTiO_3 приводит к уменьшению параметра решетки до $a = 3,9055 \text{ \AA}$ (параметр исходного SrTiO_3 $a = 3,9060 \text{ \AA}$). Некоторое уменьшение параметра решетки связано с появлением кислородных вакансий в анионной подрешетке SrTiO_3 при его частичном восстановлении. При малых концентрациях фтора, как и при восстановлении, параметр решетки уменьшается (табл.2). Вероятно, атомы фтора при таких концентрациях замещают атомы кислорода. При большом уровне фторирования имеет место заметное увеличение параметра решетки SrTiO_3 . Для образцов, содержащих 5 ат. % фтора, $a = 3,9115 \text{ \AA}$. Это увеличение параметра решетки обусловлено, вероятно, тем, что атомы фтора уже не только замещают атомы кислорода, но и внедряются в междоузлия решетки титаната стронция.

Из рис.3а видно, что несмотря на то, что большая концентрация фтора (5 ат. %) приводит к существенному увеличению напряжений ϵ_a , гомогенность системы по этому параметру несколько улучшается. Это связано с тем, что отжиг приводит к большей однородности системы по

напряжениям.

Из рис.3б следует, что средний размер когерентного домена l_a существенно увеличился, а гомогенность системы по этому параметру ухудшилась. Это можно объяснить тем, что в процессе отжига происходит также спекание, в результате чего увеличиваются средние размеры частиц, а однородность системы по этому параметру ухудшается из-за того, что в процесс спекания вовлекаются кристаллиты с различными размерами. Кроме того, отжиг сам по себе приводит к увеличению когерентно рассеивающей части кристаллита.

Авторы выражают благодарность академику В.М.Арутюняну за обсуждение результатов и В.В.Меликяну за техническую помощь при синтезе образцов.

ЛИТЕРАТУРА

1. А.Г.Саркисян, Э.В.Путный, В.М.Арутюнян, Г.Лоренц. Электрохимия, 25, N-1, 94 (1989).
2. А.Г.Саркисян, К.Г.Бегоян, Э.Л.Игнатян, Э.А.Хачатурян, Г.Э.Шахназарян. Тезисы докладов Международного совещания Фотохимия, с.33-34, Ереван, 1997.
3. Я.С.Уманский, Ю.А.Скаков, А.Н.Иванов, Л.Н.Расторгуев. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия. М., Металлургия, 1982.
4. V.S.Harutyunyan, E.S.Abovyan, P.I.M.Monteiro, M.K. Balyan, V.P. Mkrtchyan. Cement and Concrete Research, 30, 709 (2000).
5. S.Wolfram. Mathematica. Addison - Wesley. 1988.

ԲԱԶՍԱԲՅՈՒԹՅԱՆ ՏՐԻՕ₃-Ի ԿԱՌՈՒՅՎԱԾՔԻ ՎՐԱ ՖՏՈՐԱՅՄԱՆ ԱՁԴԵՑՈՒԹՅԱՆ ՈՒՆՏԳԵՆԱԴԻՖՐԱԿՑԻՈՆ ՀԵՏԱԶՈՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐ

Ե.Գ. ԶԱՐԳԱՐՅԱՆ, Վ.Ս. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Ա.Գ. ՍԱՐԳՍՅԱՆ,
Ա.Պ. ԱՅՎԱԶՅԱՆ, Կ.Հ. ԲԵԳՈՅԱՆ

Ունեղենադիֆրակցիոն մեթոդով ուսումնասիրված են տարբեր բանակությամբ ֆտոր պարունակող SrTiO₃ բազմաբյուրեղային նմուշների կառուցվածքային պարամետրերը: Որոշված են բյուրեղիկների միջին չափը, միջին դեֆորմացիան, ինչպես նաև չափի և դեֆորմացիայի դիսպերսիաները: Դիտարկված է ֆտորի տոկոսային պարունակության ազդեցությունը SrTiO₃ մորֆոլոգիայի վրա:

X-RAY DIFFRACTION INVESTIGATIONS OF F DOPING EFFECT ON THE STRUCTURE OF POLYCRYSTALLINE SrTiO₃

Y.G. ZARGARYAN, V.S. HARUTYUNYAN, A.G. SARGSYAN,
A.P. AIVAZYAN, K.H. BEGOYAN

X-ray diffraction investigations of structural parameters of SrTiO₃ polycrystalline samples with a different content of F dopants are carried out. The average sizes and strains of crystallites, as well as dispersions of these parameters are determined. The influence of F content on the morphology of SrTiO₃ is analyzed.

УДК 548.74

ПОЛНОЕ ОБРАЩЕНИЕ КОНТРАСТА КИКУЧИ-ЛИНИЙ НА ЭЛЕКТРОНОГРАММАХ КРЕМНИЯ

Р.К. КАРАХАНЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 14 июня 2001 г.)

Получены кикучи-электронограммы кремния с взаимным обращением контраста кикучи-линий избытка и недостатка по всей их протяженности. Выявлены условия, необходимые для полного обращения контраста кикучи-линий. Дан механизм обнаруженного полного обращения контраста, основанный на двойной дифракции кикучи-электронов.

В соответствии с обычно наблюдаемым контрастом кикучи-линий на фотографиях черная линия недостатка всегда расположена ближе к нулевому рефлексу, чем белая линия избытка [1]. Вместе с тем известно обращение контраста кикучи-линий вдоль их длины для электронограмм как на отражение [2-4], так и на прохождение [5,6]. Обращение контраста кикучи-линий в [4,5] объяснено на основе динамической теории рассеяния электронов. В настоящей работе, в отличие от работ [2-6], посвященных частичному обращению контраста кикучи-линий, когда линии избытка и недостатка взаимно меняют свой контраст на противоположный лишь на отдельных участках своей длины, впервые обнаружено и детально исследовано полное взаимное обращение контраста кикучи-линий, когда они меняют свой контраст на противоположный по всей длине. Показано, что это полное взаимное обращение контраста кикучи-линий легко объясняется уже в рамках элементарного механизма образования кикучи-электронограмм [1], если учесть явление двойной дифракции кикучи-электронов, когда в образовании кикучи-картин участвуют, кроме первичного, и дифрагированные электронные пучки [7].

Кикучи-электронограммы тонких монокристаллических пленок кремния, изготовленных методом химического травления массивных образцов, были получены съемкой на прохождение на электронографе ЭГ-100М при ускоряющем напряжении 100 кВ и падении электронного пучка вблизи кристаллографической оси [112] образца. На рис.1 приведена кикучи-электронограмма кремния с нормальным контрастом кикучи-линий. Как видно из этого снимка, линии недостатка $4\bar{4}0$ и $6\bar{6}0$, прохо-

дящие вблизи нулевого отражения, являются черными, а более удаленные линии избытка $\bar{4}40$ и $\bar{6}60$ являются белыми, что соответствует нормальному контрасту кикучи-линий. Отметим, что электронограмма на рис.1 снята при нахождении вблизи точного отражающего положения плоскостей (555), о чем свидетельствует сама электронограмма, на которой через нулевое отражение проходит кикучи-линия недостатка $\bar{5}55$, а через точечный рефлекс 555 проходит линия избытка 555 .

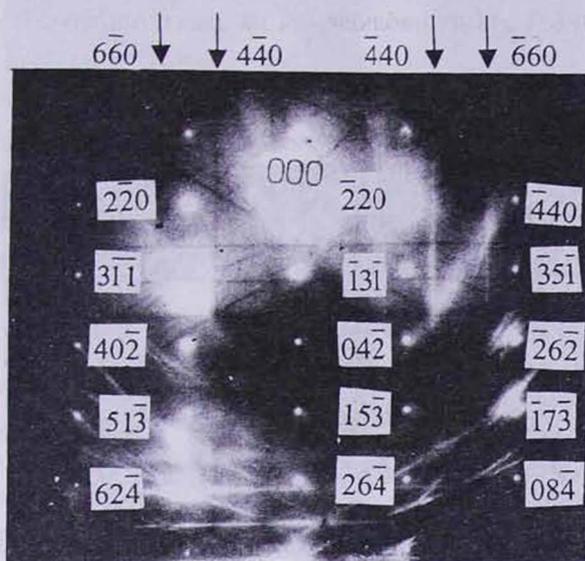


Рис.1. Электронограмма кремния с нормальным контрастом кикучи-линий 440 и 660 .

Как видно из рис.1, черные кикучи-линии недостатка $\bar{4}40$ и $\bar{6}60$ проходят вблизи ряда точечных отражений 220 , 311 , 402 , 513 , 624 , а белые линии избытка $\bar{4}40$ и $\bar{6}60$ проходят, соответственно, вблизи ряда точечных отражений 220 , 131 , 042 , 153 , 264 и 440 , 351 , 262 , 173 , 084 . Укажем, что присутствие на электронограмме запрещенных для структуры кремния отражений 402 , 042 и 262 вызвано явлением двойной дифракции электронов при образовании точечных электронограмм [1]. На рис.2 приведена кикучи-электронограмма от того же образца кремния после небольшого изменения угла между образцом и электронным пучком (около 36 угл. мин.), когда к положению отражения близки плоскости (333) и (444). Это следует из того, что вблизи нулевого отражения проходят линии недостатка $\bar{3}33$ и $\bar{4}44$, а линии избытка 333 и 444 проходят, соответственно, вблизи точечных рефлексов 333 и 444 . На рис.2 хорошо видно частичное взаимное обращение контраста линий $\bar{4}40$ и $\bar{4}40$. Действительно, в окрестности точечного рефлекса 513 черная линия не-

недостатка $\bar{4}40$ является белой, а белая линия избытка $\bar{4}40$ является черной в окрестности рефлекса $15\bar{3}$ на участке, противолежащем участку линии недостатка $\bar{4}40$ с обращенным контрастом. При этом в окрестности нулевого рефлекса линии $\bar{4}40$ и $\bar{4}40$ имеют нормальный контраст. Линии типа 660, имея уже на предыдущей электронограмме слабый контраст, теперь уже не наблюдаются, что обусловлено изменением угла между образцом и падающим электронным пучком, приведшим к нарушению дифракционных условий, необходимых для образования линий 660 с достаточным для их наблюдения на электронограмме контрастом.

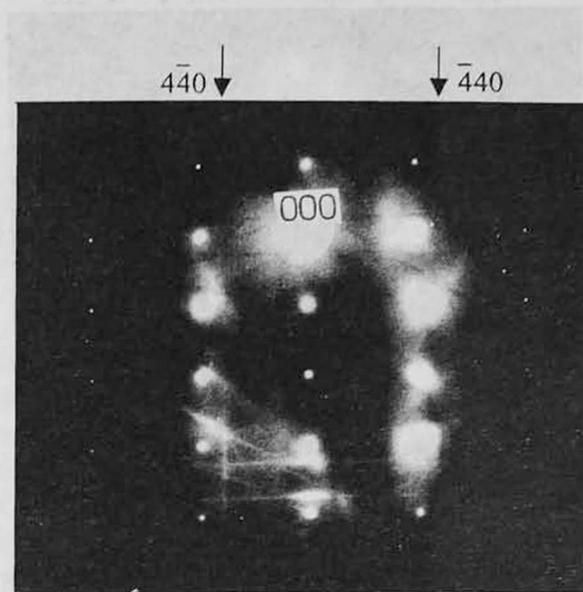


Рис.2. Электронограмма кремния с частично обращенным контрастом кикучи-линий 440.

На рис.3 приведена кикучи-электронограмма от того же образца кремния после дальнейшего изменения угла между образцом и электронным пучком (около 24 угл. мин.). В этом случае, как видно из электронограммы, вблизи нулевого рефлекса проходят линии недостатка $\bar{2}2\bar{2}$ и $\bar{3}3\bar{3}$, а линии избытка $22\bar{2}$ и $33\bar{3}$ проходят вблизи соответствующих им точечных рефлексов $22\bar{2}$ и $33\bar{3}$. Как ясно видно на рис.3, более близко расположенные к нулевому рефлексу линии $\bar{4}40$ и $\bar{6}60$ являются по всей своей протяженности белыми, а более удаленные от нулевого рефлекса линии $\bar{4}40$ и $\bar{6}60$ являются по всей своей протяженности черными, что противоречит нормальному контрасту кикучи-линий. Таким образом, можно заключить, что на рис.3 имеет место полное взаимное обращение контраста кикучи-линий (440) и (660).

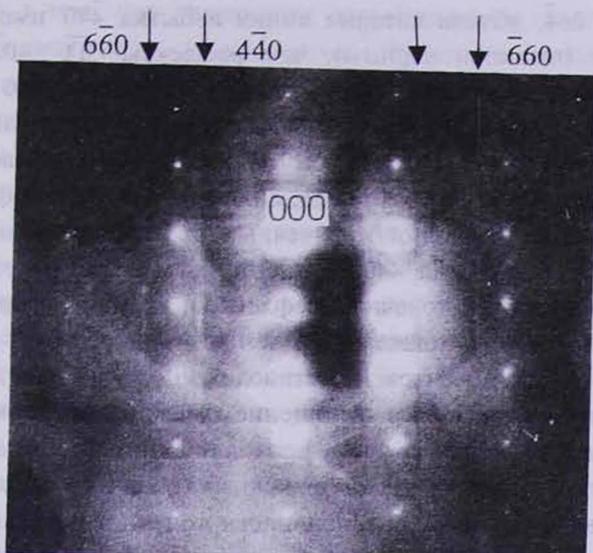


Рис.3. Электронограмма кремния с полностью обращенным контрастом кикучи-линий 440 и 660.

Отметим, что на всех трех приведенных электронограммах вертикальные кикучи-линии (440) и (660) практически не меняют своего положения относительно параллельных им рядов точечных рефлексов. Изменение угла между образцом и падающим электронным пучком приводит к сдвигу только горизонтальных кикучи-линий относительно соответствующих точечных рефлексов, что обусловлено параллельностью этих линий оси вращения образца.

Анализ полученных электронограмм выявил следующие особенности, связанные с контрастом кикучи-линий. На первой электронограмме (рис.1) с нормальным контрастом кикучи-линий точечные рефлексы, вблизи которых параллельно им проходят черные линии недостатка 440 и 660, имеют ясно выраженные большие интенсивности, чем точечные рефлексы, вблизи которых параллельно им проходят белые линии избытка 440, 660. Исключение составляет лишь рефлекс 220, который значительно слабее рефлекса 220. Но в этом случае следует учесть наличие сильного нулевого рефлекса, к которому черные линии 440, 660 расположены гораздо ближе, чем белые линии избытка 440, 660. Таким образом, линии недостатка 440, 660 проходят вблизи более интенсивных точечных рефлексов, чем соответствующие им линии избытка 440, 660.

На рис.2 для точечных рефлексов, вблизи которых проходят участки кикучи-линий с обращенным контрастом, распределение интенсивностей обратное. Здесь более интенсивными являются рефлексы

$\bar{131}$, $04\bar{2}$, $15\bar{3}$, $26\bar{4}$, вблизи которых линия избытка $\bar{440}$ имеет обращенный контраст (является черным), чем рефлексы $3\bar{11}$, $40\bar{2}$, $51\bar{3}$, $62\bar{4}$, вблизи которых расположен участок линии недостатка $\bar{440}$ с обращенным (белым) контрастом. Нормальный контраст участков линий избытка и недостатка вблизи рефлексов $\bar{220}$ и $2\bar{20}$ (в верхней части электрограммы) обусловлен, как и прежде, сильным нулевым рефлексом. Наконец, на рис.3 интенсивности точечных рефлексов, вблизи которых проходят линии недостатка $\bar{440}$, $6\bar{60}$ с полным обращением контраста, меньше интенсивностей точечных рефлексов, вблизи которых проходят линии избытка $\bar{440}$, $6\bar{60}$ также с обращенным контрастом.

Таким образом, контраст противоположащих участков данной пары кикучи-линий определяется соотношением между интенсивностями точечных рефлексов, вблизи которых проходят линии избытка и недостатка. Если линия недостатка проходит вблизи точечного рефлекса с большей интенсивностью, чем интенсивность точечного рефлекса, вблизи которого проходит соответствующая линия избытка, то контраст кикучи-линий будет нормальным – обращения контраста не происходит (рис.1). В противном случае, когда линия недостатка проходит вблизи менее интенсивного рефлекса, чем рефлекс, вблизи которого проходит соответствующая линия избытка, на противоположащих участках линий избытка и недостатка, прилегающих к этим двум рефлексам, происходит обращение контраста указанных кикучи-линий (рис.2). Когда линия избытка проходит вблизи ряда точечных рефлексов с интенсивностями, большими интенсивностей рефлексов, вблизи которых проходит линия недостатка, происходит полное взаимное обращение контраста кикучи-линий недостатка и избытка по всей их протяженности (рис.3).

В соответствии с элементарным механизмом образования кикучи-картин, нормальный контраст кикучи-линий обусловлен меньшей интенсивностью электронных волн, распространяющихся вдоль конуса недостаточной интенсивности, по сравнению с интенсивностями волн вдоль конуса избыточной интенсивности. Когда некоторый участок линии избытка проходит вблизи более сильного рефлекса, чем рефлекс, вблизи которого проходит линия недостатка, это соответствует тому, что интенсивность электронных волн вдоль соответствующего участка конуса недостаточной интенсивности становится больше интенсивности волн, распространяющихся вдоль соответствующего участка конуса избыточной интенсивности. Очевидно, что это приведет к взаимному обращению контраста кикучи-линий избытка и недостатка на противоположащих участках вблизи указанных рефлексов. Отметим, что хотя на рис.2 и 3 кикучи-линии избытка отклонены от сильных точечных рефлексов и соответствующие им дифракционные пучки не совпадают с конусом недостатка, тем не менее обращение контраста кикучи-линий имеет место вследствие двойной дифракции кикучи-электрограмм.

Это связано с тем, что увеличение интенсивности электронных волн вдоль конуса недостатка в этом случае обусловлено распространением по образующим этого конуса электронных пучков, образующихся при неупругом рассеянии вышеуказанных дифрагированных пучков, играющих роль первичного электронного пучка. В случае полного взаимного обращения контраста (рис.3) кикучи-линии избытка $\bar{440}$ и $\bar{660}$ проходят вблизи целого ряда сильных точечных рефлексов. Это значит, что вблизи конусов недостаточной интенсивности, образующих кикучи-линии $\bar{440}$ и $\bar{660}$, проходит множество дифрагированных пучков, неупругое рассеяние которых приводит к увеличению интенсивности электронных волн вдоль конусов недостатка. Так как дифрагированные пучки соседствуют друг с другом, то усиление интенсивности будет также происходить на прилегающих друг к другу участках конусов недостатка, что приводит к взаимному обращению контраста кикучи-линий по всей их длине.

Обращение контраста кикучи-линий можно интерпретировать и следующим образом. Исходя из сущности явления двойной дифракции, примем некоторый интенсивный точечный рефлекс, например, $\bar{131}$, в качестве нулевого рефлекса. Тогда относительно этого рефлекса кикучи-линии избытка $\bar{440}$ и $\bar{660}$, будучи расположены к нему ближе, чем линии недостатка $\bar{440}$, $\bar{660}$, будут линиями недостатка, а линии недостатка $\bar{440}$, $\bar{660}$ станут линиями избытка. Можно заключить, что в формировании контраста кикучи-линий избытка $\bar{440}$ и $\bar{660}$ в окрестности сильного точечного рефлекса $\bar{131}$ и соответствующих противолежащих участков линий недостатка $\bar{440}$, $\bar{660}$ преобладающую роль играет сильный дифрагированный пучок $\bar{131}$, а не первичный электронный пучок. Если распространить приведенное рассмотрение на остальные интенсивные точечные рефлексы $\bar{220}$, $\bar{042}$, $\bar{153}$, $\bar{264}$, вблизи которых проходят кикучи-линии избытка $\bar{440}$ и $\bar{660}$, то вновь станет очевидным полное обращение контраста кикучи-линий. В этом случае каждый из этих интенсивных точечных рефлексов, играя роль первичного, становится "нулевым", и проходящие в их окрестности кикучи-линии избытка будут линиями недостатка, а противолежащие участки линий недостатка $\bar{440}$, $\bar{660}$ приобретут контраст избыточной линии, т.е. станут белыми на фотографии. В результате произойдет полное взаимное обращение контраста кикучи-линий ($\bar{440}$) и ($\bar{660}$).

Следует отметить, что чем более контрастна данная пара кикучи-линий, т.е. чем больше разность интенсивностей электронных волн вдоль конусов избытка и недостатка, тем большей интенсивностью должен обладать дифрагированный пучок, чтобы изменить эту разницу в пользу конуса недостатка и привести к обращению контраста кикучи-линий. Одновременно, чем менее контрастна данная пара кикучи-линий, тем меньше может быть требуемая для обращения их контраста ин-

тенсивность дифрагированной волны, и тем дальше от сильного точечного рефлекса может проходить на электронограмме кикучи-линия избытка. С удалением линий избытка от сильного отражения в формировании их контраста начинают участвовать менее интенсивные электронные волны, образованные при неупругом рассеянии данного сильного дифрагированного пучка. Поэтому уменьшается возможность взаимного обращения контраста кикучи-линий, и тем интенсивнее должен быть дифрагированный пучок для получения обращения контраста.

Таким образом, полное взаимное обращение контраста кикучи-линий избытка и недостатка имеет место при прохождении линии избытка вблизи параллельного ей ряда интенсивных точечных рефлексов и является прямым следствием двойной дифракции кикучи-электронов. Аналогично тому, как совпадение интенсивного дифрагированного пучка с конусом избыточной интенсивности приводит к усилению линии избытка вблизи отражений с другими индексами [8], совпадение нескольких прилегающих друг к другу дифрагированных пучков с конусом недостаточной интенсивности приводит к полному взаимному обращению контраста кикучи-линий.

Работа выполнена в рамках научной темы №00-949, финансируемой из государственных централизованных источников Республики Армения.

ЛИТЕРАТУРА

1. П.Хирш, А.Хови, Р.Николсон, Д.Пэшли, М.Уэлан. Электронная микроскопия тонких кристаллов. М., Мир, 1968.
2. B.S.Miyake, K.Nayakawa, T.Kawamura, Y.H.Ohtsuki. Acta Cryst., 31, 32 (1975).
3. T.Kawamura. Phys. Stat. Solidi (a), 27, 27 (1975).
4. С.Л.Дударев, Л.М.Пенг, М.И.Рязанов. Тепловое диффузное рассеяние при дифракции электронов высокой энергии в геометрии Брэгга. Препринт №047-906, М., МИФИ, 23 с., 1990.
5. J.Gjonnes, D.Watanabe. Acta Cryst., 21, 297 (1966).
6. Р.К.Караханян, П.Л.Алексян. Кристаллография, 44, 438 (1999).
7. R.K.Karakhanyan, P.L.Aleksanyan, J.K.Manoucharova. Phys. Stat. Solidi (a), 121, K1 (1990).
8. Р.К.Караханян. Известия НАН Армении, Физика, 35, 38 (2000).

COMPLETE REVERSAL OF KIKUCHI LINES CONTRAST IN DIFFRACTION PATTERNS OF SILICON

R. K. KARAKHANYAN

The Kikuchi patterns of silicon with mutual contrast reversal of excess and defect lines over their entire length are obtained. The conditions necessary for complete contrast reversal of Kikuchi lines are revealed. The mechanism of the found complete contrast reversal is treated in terms of double diffraction of Kikuchi electrons.

УДК 541.64

ПЕРЕХОД СПИРАЛЬ-КЛУБОК В КОЛЬЦЕВЫХ ЗАМКНУТЫХ ДНК В ПРИСУТСТВИИ КОНКУРЕНТНОГО РАСТВОРИТЕЛЯ

А.В. БАДАСЯН, А.В. ГРИГОРЯН, А.Ю. ЧУХАДЖЯН,
Е.Ш. МАМАСАХЛИСОВ, В.Ф. МОРОЗОВ

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 15 августа 2001 г.)

Построен гамильтониан, описывающий переход спираль-клубок в кольцевых замкнутых ДНК (кзДНК) в рамках гамильтониана открытой цепи. Топологические ограничения, накладываемые на структуру, учитываются зависимостью приведенной энергии водородной связи от усредненной степени спиральности. Рассмотрено влияние растворителя, конкурирующего за образование водородных связей. В рамках построенного гамильтониана показано, что кривая денатурации для кзДНК может быть получена на основе кривой для открытой цепи путем преобразования температурной шкалы.

Введение

Известно, что в клетках высших животных ДНК обмотаны вокруг специальных белковых структур (гистонов) и при репликации такая ДНК разматывается (активизируется) на несколько витков, образует структуру, топологически идентичную кольцевой замкнутой ДНК (кзДНК). Кроме того, ДНК некоторых вирусов, а также цито-плазматическая ДНК высших животных внутри клетки часто находятся в кольцевой замкнутой форме. Переход спираль-клубок в таких молекулах является очень интересной проблемой, т.к. она непосредственно связана с проблемами транскрипции, репликации и репарации ДНК. Согласно экспериментальным фактам, плавление кзДНК отличается от линейной и начинается при более низких температурах, а заканчивается при более высоких. Кроме того, профиль кривой денатурации слабо зависит от нуклеотидного состава ДНК [1]. Опубликовано множество статей по экспериментальным и теоретическим исследованиям двухспиральной кзДНК [2]. В [3-9] была разработана среднеполевая теория плавления кзДНК. Главное предположение, сделанное в этих работах, состоит в том, что полная энергия кзДНК состоит из двух членов – первый соответствует линейной ДНК, второй учитывает тот факт, что молекула кольцевая и замкнутая (суперспиральный член).

В предыдущей работе была решена задача о плавлении кзДНК на основе теории плавления гомополимерной линейной ДНК с использованием гамильтонианова подхода [10] с учетом специфических условий, налагаемых на механизм разрыва водородных связей. Однако в этой работе не проведен учет влияния растворителя и задача решена в квадратичном приближении разложения приведенной энергии водородной связи. Целью данной работы является учет влияния растворителя, конкурирующего за образование водородных связей, на переход спиральных клубков в кзДНК, рассматриваемый в общем случае.

Гамильтониан модели

а) Линейная цепь

Рассмотрим молекулу двухспиральной ДНК, содержащую комплементарные азотистые основания одного сорта (гомополимер). Пронумеруем повторяющиеся единицы каждой из цепей от 0 до N . Для простоты предположим, что водородные связи внутри цепи образуются только между основаниями с одинаковыми порядковыми номерами. Кооперативность системы обеспечивается неаддитивностью петлевого фактора, все остальные виды взаимодействий (напр., стекнинг-взаимодействие) будут включены либо в энергию комплементарного спаривания оснований, либо в соответствующим образом выбранные стат.веса конформаций скелета цепи, замкнутой в петлю. Гамильтониан такой модели, согласно [10,11], имеет вид

$$-\beta H = J \sum_{i=1}^N \delta \left(\sum_{k=1}^i \gamma_k ; 0 \right), \quad (1)$$

где $J=U/T$, U – энергия образования одной водородной связи, $\beta=1/T$, $\delta(a,b)$ – символ Кронекера, а по значению $\sum_{k=1}^i \gamma_k$ можно судить о том, реализуется ли спиральная конформация [10,11]. Таким образом, гамильтониан (1) показывает, что при образовании замкнутой петли длиной в i повторяющихся единиц выделяется энергия U , иначе энергия равна нулю. Далее в тексте (1) будет для краткости записан в виде

$$-\beta H = J \sum_{i=1}^N \delta_1^{(i)}, \quad (2)$$

где $\delta_1^{(i)} \equiv \delta \left(\sum_{k=1}^i \gamma_k ; 0 \right)$.

б) кзДНК

Очевидно, что невозможно полностью отделить две цепи кзДНК, не разорвав при этом химических связей. Представим, что в некоторой части молекулы разорвано несколько межцепочечных водородных связей

и образовалась петля. Тогда каждый следующий разрыв водородных связей еще больше затрудняет разрыв водородных связей остальных повторяющихся единиц. Это означает, что процесс денатурации в каждом участке цепи зависит от конформации всей цепи и конкретно от доли разорванных водородных связей. Исходя из этих общих соображений, а также основываясь на вышеописанной модели и гамильтониане (2) линейной ДНК, мы строим гамильтониан кзДНК следующим образом.

1. кзДНК есть система, в которой состояние одной повторяющейся единицы зависит от состояния всей молекулы.
2. Сложности, возникающие при учете образования и роста петли, эффективно внесены в энергию образования водородной связи.
3. Параметр J предполагается зависящим от микроскопической (не-усредненной) доли разорванных водородных связей P :

$$J = J(P), \quad P = 1 - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta_1^i. \quad (4)$$

Теперь учтем влияние конкурентного растворителя с помощью следующих предположений.

4. Поскольку при присоединении молекул растворителя возможно их взаимное влияние, не учтенное в нашем приближении, то рассмотрим обобщенный случай с m местами посадки.
5. Образование межмолекулярных водородных связей происходит при вполне определенной ориентации молекулы растворителя относительно данных комплементарных оснований. Ориентации предполагаются дискретными. Их число равно q .
6. Каждой ориентации молекулы растворителя приписывается спиновая переменная μ_j , $j = \overline{1, m}$, каждая из которых пробегает значения от 1 до q . Номером 1 отметим состояние связанности, при котором выделяется энергия E .

Учитывая вышесказанное, гамильтониан такой модели запишется в виде:

$$-\beta H = J \sum_{k=1}^N \delta_1^{(k)} + I \sum_{k=1}^N (1 - \delta_1^{(k)}) \sum_{j=1}^m \delta_{\mu_j}, \quad (5)$$

где $I = E/T$. Все остальные обозначения те же, что и для гамильтониана линейной модели. Тогда стат.сумма имеет вид:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{\gamma'_i\}} \exp[-\beta H] = \sum_{\{\gamma'_i\}} \exp\left[\sum_{k=1}^N (J\delta_1^{(k)} + I(1 - \delta_1^{(k)}) \sum_{j=1}^m \delta_{\mu_j})\right] = \\ &= \sum_{\{\gamma'_i\}} \prod_{k=1}^N \prod_{j=1}^m \exp[J\delta_1^{(k)}] \exp[I(1 - \delta_1^{(k)})\delta_{\mu_j}]. \end{aligned} \quad (6)$$

Введя общепринятые обозначения $V = \exp(J) - 1$, $W = \exp(I) - 1$ и следуя [12], распишем произведение по j и отсуммируем по спиновым переменным μ_j . Для стат.суммы получаем:

$$Z = \sum_{\{\gamma_i\}} \prod_{k=1}^N (q+W)^m [1 + \delta_1^{(k)}] \left\{ \frac{(V+1)q^m}{(q+W)^m} - 1 \right\} = (q+W)^{mN} \sum_{\{\gamma_i\}} \prod_{k=1}^N [1 + \tilde{V} \delta_1^{(k)}], \quad (7)$$

где

$$\tilde{V} = \frac{(V+1)q^m}{(q+W)^m} - 1 = \frac{\exp[J]q^m}{[q-1+\exp(I)]^m} - 1. \quad (8)$$

Таким образом, задача о вычислении стат.суммы линейной ДНК с растворителем свелась к вакуумной, но с переопределенным энергетическим параметром V . Выразим энергию образования одной водородной связи через \tilde{V} . В вакуумной задаче $J = \ln[1+V]$, аналогично

$$\tilde{J} = \ln[1 + \tilde{V}] = J + m \ln \left[\frac{q}{q-1+\exp I} \right] = J + \Gamma, \quad (9)$$

где $\Gamma = m \ln[q/(q-1+\exp I)]$. Подставив (9) в (2), преобразуем полученное выражение

$$-\beta H = \tilde{J} \sum_{k=1}^N \delta_1^k = \tilde{J} N \frac{\sum_{k=1}^N \delta_1^k}{N} = \tilde{J} N (1-P) = J N (1-P) + \Gamma N (1-P). \quad (10)$$

Поскольку мы предположили для кЗДНК зависимость приведенной энергии водородной связи J от мгновенной степени денатурации P , то разложим $J = J(P)$ в ряд по малому параметру P и, преобразовав, запишем гамильтониан (10) и стат.сумму в виде

$$-\beta H = \tilde{J} N (1-P) = J N (1-P) + \Gamma N (1-P) = N \sum_{k=0}^M b_k P^k + \Gamma N (1-P),$$

$$Z = \sum_{\{\gamma_i\}} \exp \left[N \left\{ \sum_{k=0}^M b_k P^k + \Gamma (1-P) \right\} \right]. \quad (11)$$

Используя интегральное представление дельта-функции, видоизменим $\exp[Nb_k P^k]$ следующим образом:

$$\begin{aligned} \exp[Nb_k P^k] &= \int_{-\infty}^{\infty} dy_k \delta(y_k - P) \exp[Nb_k y_k^k] = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dy_k \frac{dz_k}{2\pi} \exp \left[N \left(b_k y_k^k + \frac{iz_k y_k}{N} \right) \right] \exp[-iz_k P]. \end{aligned} \quad (12)$$

Подставим (12) в (11) и введем обозначения $\int \dots \int dy_0 \dots dy_M \frac{dz_0}{2\pi} \dots \frac{dz_M}{2\pi} \equiv \iint Dy Dz$. Тогда

$$Z = \int_{-\infty-\infty}^{\infty \infty} Dy Dz \exp \left[N \sum_{k=0}^M \left(b_k y^k + \frac{iz_k y_k}{N} + \Gamma \right) \right] \left\{ \sum_{\{y_i\}} \exp \left[-N \left(i \sum_{k=0}^M z_k P / N + \Gamma \right) P \right] \right\}. \quad (13)$$

Таким образом, подынтегральное выражение в стат.сумме стало линейным по P и выражение в фигурных скобках идентично стат.сумме Z_0 линейной модели с гамильтонианом (2), однако статсумма находится под интегралами. В термодинамическом пределе $Z_0 \sim \lambda_0^N$ [13], где $-kT \ln \lambda_0$ есть приведенная свободная энергия на одну повторяющуюся единицу для гамильтониана (2). Введем обозначение $\sum_{k=0}^M z_k = z$, тогда

$$Z = \int_{-\infty-\infty}^{\infty \infty} Dy Dz \exp \left[N \sum_{k=0}^M \left(b_k y^k + \frac{iz_k y_k}{N} + \Gamma + \ln \lambda_0 \left(\frac{iz}{N} + \Gamma \right) \right) \right]. \quad (14)$$

Оценив этот интеграл для больших N с помощью метода перевала, получаем

$$Z \propto \exp \left[N \left(\sum_{k=0}^M (1-k) b_k y^k + \Gamma + \ln \lambda_0 \left(-\Gamma + \sum_{k=0}^M k b_k \alpha^{k-1} \right) \right) \right]. \quad (15)$$

Таким образом, модель кЗДНК с конкурентным растворителем сводится к модели линейной цепи без растворителя, только выражение для стат.суммы имеет сложный множитель, а величина λ_0 сложным образом зависит от степени денатурации α линейной ДНК: $\lambda_0 = \lambda_0 (-\Gamma + \sum_{k=0}^M k b_k \alpha^{k-1}) = \lambda_0(J)$. Для степени денатурации из (11) имеем:

$$\alpha_{k3} = \langle P \rangle = -\frac{\partial \ln Z}{N \partial b_1} = \alpha. \quad (16)$$

Таким образом, степени денатурации кольцевой замкнутой ДНК и линейной оказываются равными. Это позволяет связать между собой кривые денатурации кольцевой замкнутой ДНК и линейной. Соотношение (16) показывает, что для них зависимость степени денатурации α от своих параметров идентична. Отсюда получаем, что

$$\frac{\exp[J]}{[q-1+\exp[I]]^m} = \frac{\exp\left[\sum_{k=0}^M k b_k \alpha^{k-1}\right]}{[q-1+\exp[I]]^m}. \quad (17)$$

Рассмотрим это выражение более подробно.

1) В отсутствие растворителя, т.е. при $q=1, I=0$

$$\exp[J_0] = \exp\left[\sum_{k=0}^M kb_k \alpha^{k-1}\right]. \quad (18)$$

Принимая во внимание, что $b_k = B_k/T$ и $J_0 = U/T$ и учитывая, что равные степени денатурации линейная и кольцевая ДНК принимают при разных температурах T_L и T_R , соответственно получим:

$$T_R = T_L \left[1 + \sum_{k=0}^M k \frac{B_k}{U} \alpha^{k-1} \right]. \quad (19)$$

Это соотношение для случая $M=3$ было получено ранее в [13].

2) В присутствии растворителя, соотношение (17) позволяет упрощение, используя приближение $\exp[E/T] \gg q-1$, которое выполняется в рассматриваемом случае с очень высокой точностью при характерных значениях $T_R, T_L \sim 300\text{K}$; $E \sim 5 \text{ эВ}$ $q \sim 10$. Отсюда получим:

$$T_R = T_L \left[1 + \sum_{k=0}^M k \frac{B_k}{U - mE} \alpha^{k-1} \right]. \quad (20)$$

В общем случае T_L и T_R связаны между собой трансцендентным соотношением (17), которое можно переписать в виде

$$\frac{\exp[U/T_L]}{[q-1 + \exp[E/T_L]]^m} = \frac{(\exp U/T_R) [1 + \sum_{k=0}^M kb_k \alpha^{k-1}]}{[q-1 + \exp[E/T_R]]^m}. \quad (21)$$

Таким образом, в присутствии растворителя, конкурирующего за образование водородных связей с азотистыми основаниями, можно получить кривую денатурации для кЗДНК, используя кривую денатурации линейной ДНК. Процедура трансформации кривой линейной ДНК в кольцевую заключается в преобразовании шкалы температур, согласно уравнению (21) или используя приближение (20).

Авторы выражают глубокую благодарность Армену Алахвердянцу за ценную идею, заложенную в формуле (12). Работа выполнена благодаря гранту CRDF AB2-2006.

ЛИТЕРАТУРА

1. M.D.Frank-Kamenetskii. Biophysics-Nucleic Acids, Springer Verlag, 1998.
2. J.F.Marko, E.D.Siggia. Phys. Rev. E, 52, 2912 (1995).
3. N.Laiken. Biopolymers, 12, 11 (1973).
4. V.V.Anshelevich, A.V.Vologodskii, M.D.Frank-Kamenetskii. Biopolymers 18, 3870 (1979).
5. A.Vologodskii. Topology and Physics of Circular DNA. CRC Inc., 1992.
6. C.J.Banham. Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 76, 3870-3874(1979).

7. C.J. Vanham. Chem. Phys., 72, 3633-3639(1980).
8. A.V. Vologodskii, M.D. Frank-Kamenetskii. FEBS Letters v.131, 1, 178-180(1981).
9. Б.Н.Белинцев, А.В.Гагя. Мол. Биол., 23, 52 (1989).
10. V.F. Morozov, E.Sh. Mamasakhlisov, Sh. Hayryan, Chin-Kun Hu. Physica A, 281, 51 (2000).
11. В.Ф.Морозов, Е.Ш.Мамасакхлисов, М.С.Шагинян. Изв. НАН Армении, Физика, 33, 195 (1998).
12. Ш.А. Айрян, Н.С.Ананикян, Е.Ш.Мамасакхлисов, В.Ф.Морозов. Биофизика, 34, 384 (1989).
13. V.F. Morozov, E.Sh. Mamasakhlisov, A.V. Grigoryan, Sh. Hayryan, Chin-Kun Hu, to be published in Phys. Rev. E, 2002.

ՊԱՐՈՒՅՐ-ԿԾԻԿ ԱՆՑՈՒՄԸ ՓԱԿ ՇՐՋԱՆԱՅԻՆ ԴՆԹ-ՆԵՐՈՒՄ
ՄՅԱԿՑՈՂ ԼՈՒԾԻՉԻ ԱՌԿԱՅՈՒԹՅԱՄԸ

Ա.Վ. ԲԱԴԱՍՅԱՆ, Ա.Վ. ԳՐԻԳՈՐՅԱՆ, Ա.ՅՈՒ. ՉՈՒԽԱԶՅԱՆ,
Յ.Շ. ՄԱՄԱՍԱԽԼԻՍՈՎ, Վ.Ֆ. ՄՈՐՈԶՈՎ

Բաց շղթայի համիլտոնյանի շրջանակներում կառուցված է փակ շրջանային ԴՆԹ-նե-
րում (փշԴՆԹ) պարույր-կծիկ անցումը նկարագրող համիլտոնյանը: Կառուցվածքի վրա
վերադրվող տոպոլոգիական բարդացումները հաշվի են առնվում ջրածնային կապի բերված
էներգիայի պարույրության չմիջինացված աստիճանից կախվածության միջոցով: Զննարկ-
ված է ջրածնային կապի առաջացմանը մրցակցող լուծիչի ազդեցությունը: Կառուցված հա-
միլտոնյանի շրջանակներում ցույց է տրված, որ փշԴՆԹ-ի հալման կորը կարելի է ստանալ
բաց շղթայի հալման կորից՝ ջերմաստիճանային սանդղակի ձևափոխության միջոցով:

HELIX-COIL TRANSITION IN CIRCULAR CLOSE DNA
IN THE PRESENCE OF COMPETING SOLVENT

A.V. BADASYAN, A.V. GRIGORYAN, A.Y. CHUHADJYAN,
E.SH. MAMASAKHLISOV, V.F. MOROZOV

The Hamiltonian describing helix-coil transition in circular closed DNA (ccDNA) in
scopes of open chain Hamiltonian is constructed. Topological restrains, present in structure,
are taken into account by the reduced hydrogen bound energy's dependence on the
unaveraged degree of denaturation. The influence of solvent competing for hydrogen bound
formation, is considered. In the scopes of built Hamiltonian, it is shown that the denaturation
curve of ccDNA can be obtained from the curve for an open chain by the temperature scale
transformation.

Բ Ո Վ Ա Ն Դ Ա Կ Ո Ւ Թ Յ Ո Ւ Ն

Թ.Կ.Մելիք-Բարխուդարով. Կապի քվանտաէլեկտրադինամիկական տեսություն.	3
Է.Ա.Հակոբյան, Հ.Հ.Մաթևոսյան, Ռ.Ա.Գևորգյան, Ա.Վ.Հովհաննիսյան Լիցքավորված արագ մասնիկի հետքային դաշտը պլազմայում.	11
Հ.Մ.Առաքելյան, Ա.Հ.Գևորգյան. Արտաքին մագնիսական դաշտում գտնվող պարուրային պարբերական կառուցվածքով միջավայրի շերտի որոշ օպտիկական հատկությունները.	17
Ա.Գ.Բաղդոնով, Վ.Հ.Չալտիկյան, Ա.Վ.Շեկոյան. Մառագայթաման տարածումը կլանող երկմակարդակ քառակուսային ոչ գծայնությամբ միջավայրում.	26
Վ.Ե.Ադամյան, Ս.Ա.Մնացականյան, Է.Գ.Շառոյան. Ֆեռոմագնիսական փուլային անցման կրիտիկական ցուցանիշներն ապակարգավորված ֆ-էլեկտրոնային համաձուլվածքներում $[Gd_x(Y_{0.85}La_{0.15})_{1-x}][Zn_{0.15}Cd_{0.85}]$, $0.22 \leq x \leq 1$	35
Ե.Գ.Չարգարյան, Վ.Ս.Հարությունյան, Ա.Գ.Սարգսյան, Ա.Պ.Այվազյան, Կ.Հ.Քեզոյան. Բազմաբյուրեղային $SrTiO_3$ -ի կառուցվածքի վրա ֆուրացման ազդեցության ռենտգենադիֆրակցիոն հետազոտություններ.	44
Ռ.Կ.Կարախանյան. Կիկուճի-գծերի կոնտրաստի լրիվ շրջումը սիլիցիումի էլեկտրոնագրամների վրա.	52
Ա.Վ.Բադասյան, Ա.Վ.Գրիգորյան, Ա.Յու.Չուխաջյան, Ե.Շ.Մամասախիսով, Վ.Ֆ.Մորոզով. Պարույր-կծիկ անցումը փակ շրջանային Դ-ՆԹ-ներում մրցակցող լուծիչի առկայությամբ.	59

CONTENTS

T.K.Melik-Barkhudarov. Quantum electrodynamics theory of communication.	3
E.A.Hakobyan, H.H.Matevosyan, R.A.Gevorkyan, A.V.Hovhannisyan. Wake potential of fast charged particle moving in plasma.	11
H.M.Arakelyan, A.H.Gevorgyan. Some optical properties of a layer of medium with a helical periodic structure in an external magnetic field.	17
A.G.Bagdoev, V.O.Chaltykyan, A.V.Shekoyan. Propagation of radiation in dissipative two-level quadratically nonlinear medium.	26
V.E.Adamian, S.A.Mnatsakanyan, E.G.Sharoyan. Critical exponents of the ferromagnetic phase transition in highly disordered f-electron alloys: $[Gd_x(Y_{0.85}La_{0.15})_{1-x}][Zn_{0.15}Cd_{0.85}]$, $0.22 \leq x \leq 1$	35
Y.G.Zargaryan, V.S.Harutyunyan, A.G.Sargsyan, A.P.Aivazyan, K.H.Begoyan. X-Ray diffraction investigations of F doping effect on the structure of polycrystalline $SrTiO_3$	44
R.K.Karakhanyan. Complete reversal of kikuchi lines contrast in diffraction patterns of silicon.	52
A.V.Badasyan, A.V.Grigoryan, A.Y.Chuhadjyan, E.Sh.Mamasakhlisov, V.F.Morozov. Helix-coil transition in circular close DNA in the presence of competing solvent.	59

СОДЕРЖАНИЕ

Т.К.Мелик-Бархударов. Квантовоэлектродинамическая теория связи.	3
Э.А.Акопян, Г.Г.Матевосян, Р.А.Геворкян, А.В.Оганесян. Кильватерный потенциал быстрой заряженной частицы в плазме.	11
О.М.Аракелян, А.А.Геворгян. Некоторые особенности оптических свойств слоя спиральной периодической среды во внешнем магнитном поле.	17
А.Г.Багдоев, В.О.Чалтыкян, А.В.Шекоян. Распространение излучения в диссипативной двухуровневой среде с квадратичной нелинейностью.	26
В.Е.Адамян, С.А.Мнацакян, Э.Г.Шароян. Критические показатели ферромагнитного фазового перехода в сильно разупорядоченных f-электронных сплавах $[Gd_x(Y_{0.85}La_{0.15})_{1-x}][Zn_{0.15}Cd_{0.85}]$, $0.22 \leq x \leq 1$	35
Е.Г.Заргарян, В.С.Арутюнян, А.Г.Саркисян, А.П.Айвазян, К.Г.Бегоян. Рентгенодифракционные исследования влияния фторирования на структуру поликристаллического $SrTiO_3$	44
Р.К.Караханян. Полное обращение контраста кичуци-линий на электронограммах кремния.	52
А.В.Бадасян, А.В.Григорян, А.Ю.Чухаджян, Е.Ш.Мамасакхлисов, В.Ф.Морозов. Переход спираль-клубок в кольцевых замкнутых ДНК в присутствии конкурентного растворителя.	59

Заказ №287. Тираж 200.

Сдано в набор 12.09.2001. Подписано к печати 21.12.2001.

Печ. л. 4,2. Бумага КУМ-ultra. Цена договорная.

Типография издательства "Гитутюн" НАН РА.

375019, Ереван, пр. Маршала Баграмяна, 24.