

ISSN 0002-3035

ФИЗИКА · ՖԻԶԻԿԱ · PHYSICS



ИЗВЕСТИЯ  
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК АРМЕНИИ

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ  
ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԳՁԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ

PROCEEDINGS  
OF NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF ARMENIA

37, N5, 2002

ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ՀԱՆՐԱՊԵՏՈՒԹՅԱՆ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱ  
НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК РЕСПУБЛИКИ АРМЕНИЯ

Տ Ե Ղ Ե Կ Ա Գ Ի Բ    ИЗВЕСТИЯ  
ՖԻԶԻԿԱ    ФИЗИКА

ՀԱՏՈՐ    ТОМ

**37**

№ 5



ՀՀ ԳԱՍ «ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆ» ՀՐԱՏԱՐԱԿՉՈՒԹՅՈՒՆ ԻԶԴԱՏԵԼՅՏՎՈ «ԴԻՄՊՏԻՍ» ՆԱՆ ԲԱ  
ԵՐԵՎԱՆ ԵՐԵՎԱՆ  
2002

© 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

#### ԽՄԲԱԳՐԱՎԱՆ ԿՈԼԵԳԻԱ

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.

УДК 537.87

## ИЗЛУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОНА, ВРАЩАЮЩЕГОСЯ ВНУТРИ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ЦИЛИНДРА

А.С. КОТАНДЖЯН, А.А. СААРЯН

Институт прикладных проблем физики НАН Армении

(Поступила в редакцию 26 июня 2002 г.)

Рассмотрено излучение заряженной частицы, равномерно вращающейся по окружности внутри диэлектрического цилиндра, погруженного в однородную среду. Найдено поле излучения вне цилиндра на больших расстояниях от него. Выведена формула для интенсивности излучения во внешнее (по отношению к цилиндру) пространство. На основе полученной формулы подробно исследованы частотно-угловые характеристики излучения. Приводятся результаты численных расчетов числа излученных квантов и проведено сравнение с интенсивностью синхротронного излучения в вакууме. Показано, что при некоторых значениях параметров задачи появляются узкие сильные пики в угловом распределении числа испущенных квантов. Выявлены необходимые условия наличия этих пиков.

### 1. Введение

Классическая теория синхротронного излучения в результате широкого фронта исследований приобрела известную степень завершенности и вошла в ряд монографий и обзоров (см., например, [1-3] и приведенные там ссылки). Последние годы характерны новым важным этапом в развитии теории этого излучения – его широким использованием в научных исследованиях. В связи с этим, актуальным является исследование различных механизмов управления характеристиками синхротронного излучения. В частности, представляются важными исследования воздействия среды на параметры этого излучения. Излучение заряда, равномерно вращающегося в однородной среде, рассматривалось в [4], где показано, что наложение синхротронного и черенковского излучений приводит к интересным эффектам. Синхротронное излучение в средах со сферической и цилиндрической симметриями исследовано в цикле работ [5-12]. В работе [7] развит рекуррентный способ построения функции Грина электромагнитного поля для среды, состоящей из произвольного числа соосных цилиндрических слоев. Основанное на результатах этой работы исследование излучения при вращении заряда вокруг диэлектрического цилиндра, погруженного в однородную среду

[7,10], показало, что при выполнении условия Черенкова для вещества цилиндра и скорости изображения заряда на поверхности цилиндра появляются высокие узкие пики в угловом распределении числа квантов, излученных во внешнее пространство. Для некоторых значений параметров плотность числа квантов в этих пиках превышает соответствующую величину для излучения в вакууме на несколько порядков. Излучение заряда, вращающегося внутри цилиндрического волновода с проводящими стенками, рассмотрено в [11,13,14].

Данная работа посвящена исследованию излучения заряда, равномерно вращающегося внутри диэлектрического цилиндра, погруженного в однородную среду. Исследованы частотно-угловые характеристики интенсивности излучения во внешнее пространство. Приведены результаты соответствующих численных расчетов, проведено сравнение с интенсивностью синхротронного излучения в вакууме.

## 2. Поле вне цилиндра

Пусть заряд  $q$  равномерно вращается со скоростью  $v$  по окружности с радиусом  $\rho_0$  в плоскости  $z=0$  внутри цилиндра с радиусом  $\rho_1$  и осью  $z$ . Диэлектрическая проницаемость вещества внутри цилиндра равна  $\epsilon_0$  и цилиндр погружен в однородную среду с проницаемостью  $\epsilon_1$  (магнитную проницаемость для простоты полагаем равной единице). 4-вектор потенциала электромагнитного поля определяется через функцию Грина (ФГ) по формуле

$$A_l(\vec{r}, t) = -\frac{1}{2\pi^2 c} \int G_{il}(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') j_l(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' dt', \quad l = t, \rho, \varphi, z, \quad (1)$$

где  $c$  – скорость света в вакууме,  $j(t, \mathbf{r})$  – 4-вектор плотности тока заряда. В соответствующем образом выбранной цилиндрической системе координат  $(\rho, \varphi, z)$  пространственная часть последнего имеет вид

$$j_l = \frac{vq}{\rho_0} \delta(\rho - \rho_0) \delta(\varphi - \omega_0 t) \delta(z) \delta_{l\varphi}, \quad v = \omega_0 \rho_0, \quad l = \rho, \varphi, z. \quad (2)$$

Для статической и цилиндрически-симметричной среды ФГ можно представить в виде следующего Фурье-разложения:

$$G_{il} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z d\omega G_{il}(m, k_z, \omega, \rho, \rho') \exp[i(m(\varphi - \varphi') + k_z(z - z') - \omega(t - t'))]. \quad (3)$$

Подстановка выражений (2) и (3) в формулу (1) для пространственных компонент векторного потенциала приводит к следующему результату:

$$A_i(\mathbf{r}, t) = -\frac{vq}{\pi c} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \exp[im(\varphi - \omega_0 t)] \int_{-\infty}^{\infty} \exp(ik_z z) G_{i\varphi}(m, k_z, \omega_0, \rho, \rho_0) dk_z, \quad i = \rho, \varphi, z. \quad (4)$$

Ниже мы рассмотрим поля в области вне цилиндра, полагая  $\rho > \rho_1$ . Воспользовавшись выражением ФГ, приведенным в работе [7], находим:

$$\begin{aligned} G_{\rho\varphi}(m, k_z, \omega_0, \rho, \rho_0) &= \frac{i}{2} [B_m^{(+)} H_{m+1}(\lambda_1 \rho) - B_m^{(-)} H_{m-1}(\lambda_1 \rho)], \\ G_{\varphi\varphi}(m, k_z, \omega_0, \rho, \rho_0) &= \frac{1}{2} [B_m^{(+)} H_{m+1}(\lambda_1 \rho) + B_m^{(-)} H_{m-1}(\lambda_1 \rho)], \\ G_{z\varphi}(m, k_z, \omega_0, \rho, \rho_0) &= 0, \end{aligned} \quad (5)$$

где  $H_m(x) \equiv H_m^{(1)}(x)$  – функция Ганкеля первого рода. Коэффициенты  $B_m^{(\alpha)}$  определяются выражениями

$$B_m^{(\alpha)} = \frac{1}{\rho_1 W(J_{m+\alpha}, H_{m+\alpha})} \left\{ J_{m+\alpha}(\lambda_0 \rho_0) + \frac{\alpha \lambda_1 H_m(\lambda_1 \rho_1) J_{m+\alpha}(\lambda_0 \rho_1)}{2 \rho_1 \beta_1} \sum_{p=\pm 1} \frac{J_{m+p}(\lambda_0 \rho_0)}{W(J_{m+p}, H_{m+p})} \right\}, \quad (6)$$

где  $J_m(x)$  – функция Бесселя и, как и в работах [7,10],

$$\lambda_j = \frac{m \omega_0}{c} \sqrt{\varepsilon_j - \frac{c^2 k_z^2}{m^2 \omega_0^2}}, \quad j = 0, 1, \quad (7)$$

$$\rho_1 \bar{\beta}_1 = \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_1 - \varepsilon_0} - \frac{\lambda_0 J_m(\lambda_0 \rho_1)}{2} \sum_{l=\pm 1} l \frac{H_{m+l}(\lambda_1 \rho_1)}{W(J_{m+l}, H_{m+l})}. \quad (8)$$

В (6) и (8) введено обозначение

$$W(a, b) = a(\lambda_0 \rho_1) \frac{\partial b(\lambda_1 \rho_1)}{\partial \rho_1} - b(\lambda_1 \rho_1) \frac{\partial a(\lambda_0 \rho_1)}{\partial \rho_1}. \quad (9)$$

Подставив выражение для ФГ в формулу (4), получаем

$$A_l(x) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \exp[im(\varphi - \omega_0 t)] \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \exp(ik_z z) A_{ml}(k_z, \rho), \quad (10)$$

где

$$A_{ml}(k_z, \rho) = \frac{vq}{2\pi c i^l} \sum_{\alpha=\pm 1} \alpha^l B_m^{(\alpha)} H_{m+\alpha}(\lambda_1 \rho), \quad A_{mz}(k_z, \rho) = 0, \quad \rho > \rho_1, \quad l = 1, 2 \quad (11)$$

(значения индекса  $l = 1, 2$  соответствуют координатам  $\rho, \varphi$ ). В формуле (10) слагаемое с  $m = 0$  не зависит от времени и, следовательно, не дает вклада в поле излучения. Поэтому при рассмотрении поля излучения можно полагать  $m \neq 0$ . Скалярный потенциал  $\phi$  находим из условия калибровки Лоренца:

$$\phi = -\frac{vq}{2\pi m \omega_0 \varepsilon_1} \lambda_1 (B_m^{(+)} + B_m^{(-)}) H_m(\lambda_1 \rho). \quad (12)$$

Напряженности же поля определяются известным образом.

### 3. Спектрально-угловое распределение интенсивности излучения на больших расстояниях

На больших расстояниях от цилиндра,  $\rho \gg \rho_1$ , интеграл по  $k_z$  можно оценить методом стационарной фазы [15]. Заменяв функцию Ганкеля ее асимптотикой при больших значениях аргумента, нетрудно видеть, что основной вклад дает стационарная точка

$$k_z = k_{z0} = \frac{m\omega_0}{c} \sqrt{\varepsilon_1} \cos \vartheta. \quad (13)$$

Усредненное по периоду движения угловое распределение интенсивности излучения заряда на больших расстояниях от оси цилиндра и на частоте  $m\omega_0 = mv/\rho_0$  определяется формулой

$$\frac{dI_m}{d\Omega} = \frac{q^2 m^2 \omega_0^2}{2\pi^3 c \sqrt{\varepsilon_1}} \beta_1^2 \left\{ \left| B_m^{(+)} - B_m^{(-)} \right|^2 + \left| B_m^{(+)} + B_m^{(-)} \right|^2 \cos^2 \vartheta \right\}, \quad \beta_1 = v \sqrt{\varepsilon_1} / c, \quad (14)$$

где коэффициенты  $B_m^{(\pm)}$  приведены в (6), а для  $\lambda_j$  из (7), имея в виду (13), получаем следующие выражения:

$$\lambda_1 = \frac{m\omega_0}{c} \sqrt{\varepsilon_1} \sin \vartheta, \quad \lambda_0 = \frac{m\omega_0}{c} \sqrt{\varepsilon_0 - \varepsilon_1 \cos^2 \vartheta}. \quad (15)$$

В случае  $\varepsilon_1 > \varepsilon_0$  в интервале углов  $|\cos \vartheta| > \sqrt{\varepsilon_0 / \varepsilon_1}$  значение  $\lambda_0$  становится мнимым. В результате коэффициенты  $B_m^{(\alpha)}$  экспоненциально стремятся к нулю с уменьшением  $\rho_0$ . Понятно, что то же самое можно сказать об интенсивности излучения.

Число квантов, излученных на гармонике  $m$  в телесном угле  $d\Omega$  в течение одного периода вращения, можно представить в виде

$$\frac{dN_m}{d\Omega} = \frac{q^2 m}{\pi^2 c \hbar \sqrt{\varepsilon_1}} \beta_1^2 \left\{ \left| B_m^{(+)} - B_m^{(-)} \right|^2 + \left| B_m^{(+)} + B_m^{(-)} \right|^2 \cos^2 \vartheta \right\}. \quad (16)$$

Для частицы, вращающейся в однородной среде  $\varepsilon_1 = \varepsilon_0$ , из (6) следует, что

$$B_m^{(\alpha)} = \frac{\pi}{2i} J_{m+\alpha} \left( mv \sqrt{\varepsilon_0} \sin \vartheta / c \right), \quad (17)$$

и из (14), (16) можно получить формулу, выведенную В.Н.Цытовичем [4].

Рассмотрим нерелятивистский предел формулы (14), полагая

$$\frac{mv \rho_1}{c \rho_0} \ll 1. \quad (18)$$

Воспользовавшись условиями  $\lambda_1 \rho_1, \lambda_0 \rho_1 \ll 1$ , которые следуют из (18), и

асимптотическими выражениями функций Бесселя для малого аргумента [16], получаем

$$\frac{dI_m}{d\Omega} = \frac{2q^2 c}{\pi \rho_0^2 \varepsilon_1^{3/2} (m!)^2} \left( \frac{m\beta_1}{2} \right)^{2m+2} \left( 1 + \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_0}{\varepsilon_1 + \varepsilon_0} \right)^2 (1 + \cos^2 \vartheta) \sin^{2(m-1)} \vartheta. \quad (19)$$

Отсюда следует, что в нерелятивистском пределе основной вклад в интенсивность излучения дает первая гармоника  $m=1$ .

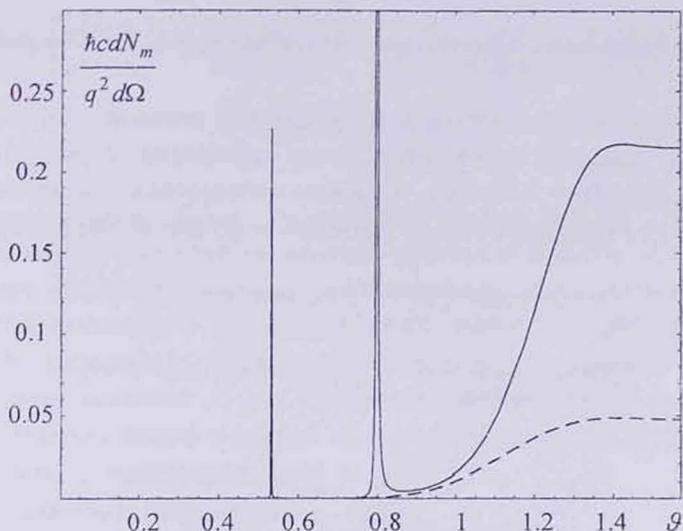


Рис.1. Зависимость угловой плотности числа излученных квантов  $(\hbar c/q^2)dN_m/d\Omega$  от угла излучения  $\vartheta$ , в случае  $E=1.5$  MeV,  $\rho_1/\rho_0=1.05$ ,  $m=16$ ,  $\varepsilon_0=3$  ( $\varepsilon_1=1$ ) (сплошная кривая) и  $\varepsilon_0 = \varepsilon_1 = 1$  (пунктирная кривая).

На основе формулы (16) нами были проведены численные расчеты углового распределения числа излученных квантов для различных значений параметров задачи: энергия электрона, диэлектрические проницаемости, радиусы орбиты и цилиндра, номер гармоники. На рис.1 приведена угловая зависимость числа излученных квантов в вакууме (пунктирная кривая) и при наличии цилиндра с проницаемостью  $\varepsilon_0 = 3$  ( $\varepsilon_1 = 1$ ) (сплошная кривая) для значений  $E=1.5$  MeV,  $\rho_1/\rho_0=1.05$  и  $m=16$ . Второму случаю соответствует кривая с сильно выраженными узкими пиками. Эти пики отдельно изображены на рис.2. Для значений параметра  $\rho_1/\rho_0$ , достаточно близких к единице, такое поведение характерно и при других значениях параметров задачи.

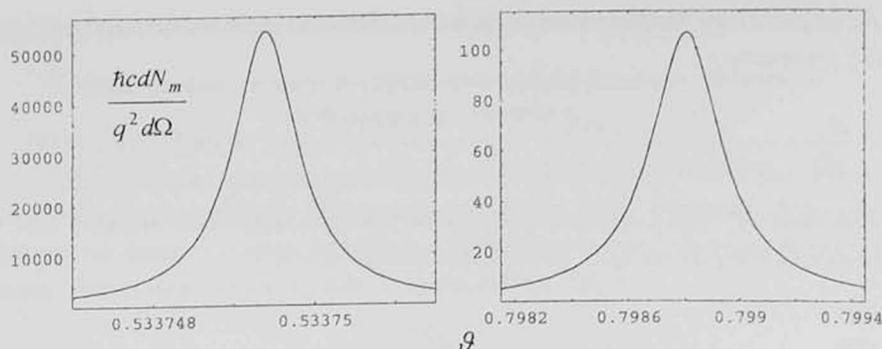


Рис.2. Узкие пики, соответствующие случаю  $\varepsilon_0 = 3$ ,  $\varepsilon_1 = 1$  на рис.1.

Появление узких пиков в графиках для угловой плотности числа квантов при больших значениях номера гармоники объясняется следующим образом. При больших  $m$ , воспользовавшись асимптотическими формулами для цилиндрических функций и функций Эйри [16], имеем

$$\begin{aligned}
 J_m(my) &\sim \frac{1}{\sqrt{2\pi} m^{1/2} (1-y^2)^{1/4}} \exp[-m\zeta_1(y)], \quad y < 1, \\
 Y_m(my) &\sim \frac{2}{\sqrt{2\pi} m^{1/2} (1-y^2)^{1/4}} \exp[m\zeta_1(y)], \quad y < 1,
 \end{aligned}
 \tag{20}$$

где

$$\zeta_1(y) = \ln \frac{1 + \sqrt{1-y^2}}{y} - \sqrt{1-y^2}.
 \tag{21}$$

При  $y > 1$  в соответствующих асимптотических формулах вместо экспоненциальной функции фигурируют функция  $\sin$  – в асимптотике для  $J_m(my)$  и функция  $\cos$  – в асимптотике для  $Y_m(my)$ . Из приведенных формул следует, что при  $y < 1$  отношение  $J_m(my)/Y_m(my)$  экспоненциально мало при больших  $m$ . Поэтому далее в интересующем нас случае будем полагать  $\lambda_1 \rho_1 / m < 1$ . Разлагая по малому отношению  $J_m(my)/Y_m(my)$ , для коэффициента  $\bar{\beta}_1$  (см. (8)) получаем

$$\rho_1 \bar{\beta}_1 \approx \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_1 - \varepsilon_0} - \frac{\lambda_0}{2} \sum_{l=\pm 1} C_m^{(l)} \left\{ 1 + i \left[ \frac{W(J_{m+l}, J_{m+l})}{W(J_{m+l}, Y_{m+l})} - \frac{J_{m+l}(\lambda_0 \rho_1)}{Y_{m+l}(\lambda_1 \rho_1)} \right] \right\},
 \tag{22}$$

где

$$C_m^{(l)} = l \frac{J_m(\lambda_0 \rho_1) Y_{m+l}(\lambda_1 \rho_1)}{W(J_{m+l}, Y_{m+l})},
 \tag{23}$$

и второе слагаемое в фигурных скобках экспоненциально мало при больших  $m$ . Отсюда следует, что в точках, где действительная часть функции  $\bar{\beta}_1$  равна нулю, вклад мнимой части в интенсивность излуче-

ния может быть экспоненциально большим. Соответствующее условие имеет вид

$$\lambda_0 \sum_{l=\pm 1} C_m^{(l)} = \frac{2\varepsilon_0}{\varepsilon_1 - \varepsilon_0}. \quad (24)$$

Заметим, что это уравнение получается из уравнения, определяющего собственные моды диэлектрического цилиндра (см. [10]), заменой  $H_m \rightarrow Y_m$ .

Для последующего анализа уравнение (24) удобно записать в виде

$$\begin{aligned} \left( \lambda_0 \frac{Y'_m(\lambda_1 \rho_1)}{Y_m(\lambda_1 \rho_1)} - \lambda_1 \frac{J'_m(\lambda_0 \rho_1)}{J_m(\lambda_0 \rho_1)} \right) \left( \lambda_0 \frac{\varepsilon_1 Y'_m(\lambda_1 \rho_1)}{\varepsilon_0 Y_m(\lambda_1 \rho_1)} - \lambda_1 \frac{J'_m(\lambda_0 \rho_1)}{J_m(\lambda_0 \rho_1)} \right) = \\ = \frac{m^2}{\rho_1^2} \left( 1 - \frac{\lambda_0^2}{\lambda_1^2} \right) \left( \frac{\lambda_1^2}{\lambda_0^2} - \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0} \right). \end{aligned} \quad (25)$$

Рассмотрим случай  $\lambda_0^2 < 0$  (возможный только при  $\varepsilon_0 < \varepsilon_1$ ) и вместо  $J_m(\lambda_0 \rho_1)$  введем модифицированную функцию Бесселя  $I_m(|\lambda_0| \rho_1)$ . Воспользуемся соответствующими равномерными асимптотическими формулами при больших  $m$  и разрешим уравнение (25) относительно  $\varepsilon_0 / \varepsilon_1$ , считая  $\lambda_l$  заданными величинами. В результате получим  $\varepsilon_1 < \varepsilon_0$ , что противоречит условию  $\lambda_0^2 < 0$ . Следовательно, указанная выше возможность появления пиков в случае  $\lambda_0^2 < 0$  исключается. Поэтому ниже будем полагать  $\lambda_0$  действительным:  $\cos^2 \vartheta < \varepsilon_0 / \varepsilon_1$ .

Рассмотрим ряд случаев.

а) Пусть сначала  $\lambda_0 \rho_0 > m$ , откуда следует, что  $\lambda_0 \rho_1 > m$ . С учетом ранее принятого нами условия  $\lambda_1 \rho_1 < m$  это означает, что  $\lambda_1 < \lambda_0$ , т.е.  $\varepsilon_0 > \varepsilon_1$ . Для решений уравнения (24) вклад первого слагаемого выражения в фигурных скобках в правой части формулы (22) равен нулю. С учетом асимптотик (20) для плотности числа излученных квантов в соответствующих пиках получаем следующую оценку:

$$dN_m / d\Omega \sim \exp[2m\zeta_1(\lambda_1 \rho_1 / m)], \quad (26)$$

где функция  $\zeta_1 = \zeta_1(y)$  определена в (21).

б) Пусть теперь  $\lambda_0 \rho_0 < m$  и  $\lambda_0 \rho_1 > m$ . Подстановка асимптотических выражений (20) в формулу (16) показывает, что пики возникают только при условии  $\lambda_1 \rho_1 < \lambda_0 \rho_0$ , которое возможно только при  $\varepsilon_0 > \varepsilon_1$ . При этом для угловой плотности числа квантов в пиках имеем

$$dN_m / d\Omega \sim \exp\{2m[\zeta_1(\lambda_1 \rho_1 / m) - \zeta_1(\lambda_0 \rho_0 / m)]\}. \quad (27)$$

в) В случае  $\lambda_0 \rho_1 < m$  имеем также, что  $\lambda_0 \rho_0 < m$ . Вновь воспользовавшись асимптотиками (20), можно показать, что в этом случае уравнение (25) не имеет решений и поэтому узкие пики отсутствуют.

Таким образом, в качестве необходимых условий наличия высо-

ких пиков в угловом распределении интенсивности излучения имеем  $\lambda_1 \rho_1 < m$ ,  $\lambda_0 \rho_1 > m$ , или в терминах угла  $\vartheta$

$$\frac{\omega_0 \rho_1}{c} \sqrt{\varepsilon_1} \sin \vartheta < 1 < \frac{\omega_0 \rho_1}{c} \sqrt{\varepsilon_0 - \varepsilon_1 \cos^2 \vartheta}, \quad (28)$$

что возможно только при  $\varepsilon_0 > \varepsilon_1$ . В частности, отсюда следует, что  $\omega_0 \rho_1 \sqrt{\varepsilon_0} / c > 1$ , и поэтому должно выполняться условие Черенкова для скорости изображения заряда на поверхности цилиндра  $\omega_0 \rho_1$  и диэлектрической проницаемости вещества цилиндра. С помощью приведенных выше рассуждений можно оценить также ширину наиболее высоких пиков. Учитывая (22) и разлагая  $\rho_1 \bar{\beta}_1$  по углу в окрестности центра пика  $\vartheta = \vartheta_0$ , нетрудно видеть, что в этой окрестности угловая зависимость интенсивности излучения имеет вид

$$\frac{dI_m}{d\Omega} \sim \frac{1}{(\vartheta - \vartheta_0)^2 + b_1^2}, \quad (29)$$

где

$$b_1 \sim J_{m+1}(\lambda_1 \rho_1) / Y_{m+1}(\lambda_1 \rho_1) \Big|_{\vartheta=\vartheta_0} \sim \exp[-2m\zeta_1(\omega_0 \rho_1 \sqrt{\varepsilon_1} \sin \vartheta_0 / c)]. \quad (30)$$

Отсюда следует, что ширина пика имеет порядок

$$\Delta \vartheta \sim \exp[-2m\zeta_1(\omega_0 \rho_1 \sqrt{\varepsilon_1} \sin \vartheta_0 / c)]. \quad (31)$$

Из (26), (27) следует, что в пиках число излученных квантов экспоненциально возрастает с ростом  $m$ . Однако следует иметь в виду, что в реалистических ситуациях интенсивность излучения в пиках не может бесконечно возрастать с увеличением  $m$ . В частности, фактором, ограничивающим рост, является учет мнимой части диэлектрической проницаемости  $\varepsilon'_i$ ,  $i=0,1$ . Это обстоятельство приводит к дополнительному слагаемому в знаменателе формулы (29), пропорциональному отношению  $\varepsilon''_i / \varepsilon'_i$ , где  $\varepsilon'_i$  — действительная часть диэлектрической проницаемости. В результате, при  $b_1 \leq \varepsilon''_i / \varepsilon'_i$  интенсивность и ширина пиков определяются именно этим слагаемым и происходит насыщение роста интенсивности пиков с увеличением  $m$ . Поскольку  $\zeta_1(y)$  является монотонно убывающей функцией, то в случае, соответствующем (26), показатель экспоненты при заданном  $m$  тем больше, чем меньше угол  $\vartheta$ .

На рис.3 приведена зависимость угловой плотности числа излученных квантов  $(\hbar c / q^2) dN_m / d\Omega$  от угла  $\vartheta$  для значений  $\rho_1 / \rho_0 = 5$  (левая кривая) и  $\rho_1 / \rho_0 = 10$  (правая кривая). Остальные параметры те же, что и на рис.1. Угловая зависимость для случая  $\varepsilon_1 > \varepsilon_0$  имеет совсем другой характер, что проиллюстрировано на рис.4 в случаях  $\varepsilon_0 = 1$ ,  $\varepsilon_1 = 3$  (сплошная кривая) и  $\varepsilon_0 = \varepsilon_1 = 1$  (пунктирная кривая). Все остальные параметры те же, что и на рис.1.

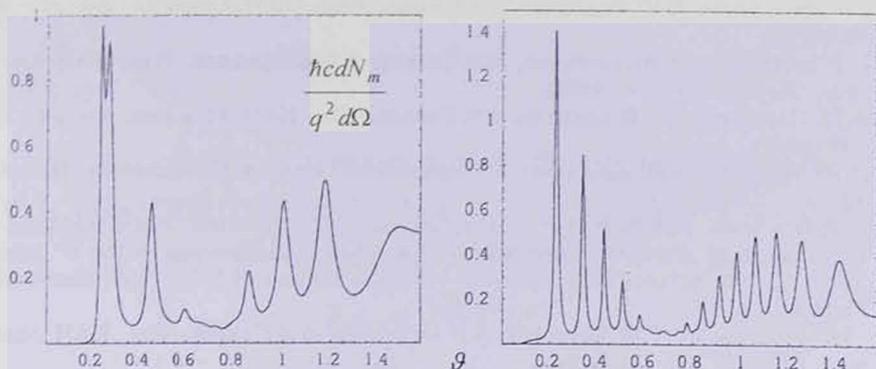


Рис.3. Зависимость угловой плотности числа излученных квантов  $(\hbar c/q^2)dN_m/d\Omega$  от угла  $\vartheta$ , для значений  $\rho_1/\rho_0 = 5$  (левый рисунок) и  $\rho_1/\rho_0 = 10$  (правый рисунок). Остальные параметры те же, что и на рис.1.

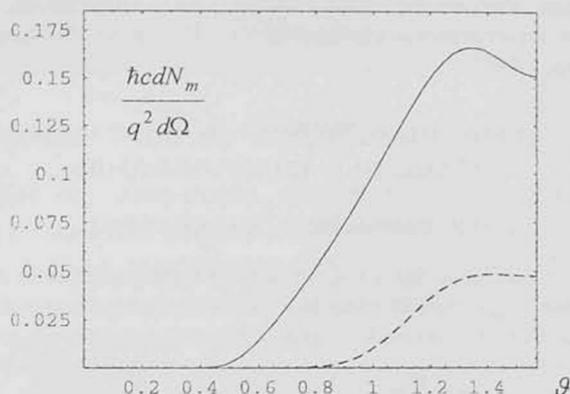


Рис.4. Зависимость угловой плотности числа излученных квантов  $(\hbar c/q^2)dN_m/d\Omega$  от угла  $\vartheta$  в случае  $\varepsilon_0 = 1, \varepsilon_1 = 3$  (сплошная кривая) и  $\varepsilon_0 = \varepsilon_1 = 1$  (пунктирная кривая). Остальные параметры те же, что и на рис.1.

Авторы выражают искреннюю благодарность Л.Ш.Григоряну за постановку задачи и ценные обсуждения, а также С.Р.Арзуманяну и Г.Ф.Хачатряню за постоянный интерес к работе и многочисленные стимулирующие обсуждения. Работа выполнена в рамках гранта 1361 Министерства образования и науки РА.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. А.А.Соколов, И.М.Тернов. Релятивистский электрон. М., Наука, 1983.
2. И.М.Тернов, В.В.Михайлин. Синхротронное излучение. Теория и эксперимент. М., Энергоатомиздат, 1986.
3. И.М.Тернов. УФН, 165, 429 (1995).

4. В.Н.Цыгович. Вест. МГУ, 11, 27 (1951).
5. С.Р.Арзуманян, Л.Ш.Григорян, А.А.Саарян. Изв. НАН Армении, Физика, 30, 99 (1995).
6. С.Р.Арзуманян, Л.Ш.Григорян, А.А.Саарян, Х.В.Котанджян. Изв. НАН Армении, Физика, 30, 106 (1995).
7. Л.Ш.Григорян, А.С.Котанджян, А.А.Саарян. Изв. НАН Армении, Физика, 30, 239 (1995).
8. Л.Ш.Григорян, Г.Ф.Хачатрян, С.Р.Арзуманян. Изв. НАН Армении, Физика, 33, 267 (1998).
9. L.Sh.Grigorian, H.F.Khachatryan, P.F.Kazarian. "On abnormal intense radiation of the rotation of electron around a dielectric sphere". Proceedings of the 8<sup>th</sup> Intern. Symp. on the Science & Technology of Light Sources (LS-8), 1998, Greifswald, Germany, p.396.
10. А.С.Котанджян, Г.Ф.Хачатрян, А.В.Петросян, А.А.Саарян. Изв. НАН Армении, Физика, 35, 115 (2000).
11. А.С.Котанджян, А.А.Саарян. Изв. НАН Армении, Физика, 36, 310 (2001).
12. Л.Ш.Григорян, С.Р.Арзуманян, Г.Ф.Хачатрян. "Об интенсивном излучении электрона, вращающегося внутри диэлектрического шара". Изв. НАН Армении, Физика (в печати).
13. М.Л.Левин. ЖТФ, 17, 1159 (1947).
14. Г.Г.Карпетян. Изв. АН Арм. ССР, Физика, 12, 186 (1977).
15. М.В.Федорюк. Асимптотика: Интегралы и ряды. М., Наука, 1987.
16. Справочник по специальным функциям. Под ред. М.Абрамовица и И.Стиган. М., Наука, 1979.

ԴԻԷԼԵԿՏՐԱԿԱՆ ԳԼԱՆԻ ՆԵՐՍՈՒՄ ՊՏՏՎՈՂ  
ԷԼԵԿՏՐՈՆԻ ԾԱՌԱԳԱՅՅՈՒՄԸ

Ա.Ս. ՔՈՏԱՆՋՅԱՆ, Ա.Ա. ՍԱՀԱՐՅԱՆ

Դիտարկված է համասեռ միջավայր ընկղմված դիէլեկտրական գլանի ներսում հավասարաչափ պտտվող լիցքավորված մասնիկի ճառագայթումը: Որոշված է ճառագայթման դաշտը լիցքից մեծ հեռավորությունների վրա: Արտածված է բանաձև գլանից դուրս միջավայրում ճառագայթման ինտենսիվության համար: Այդ բանաձևի հիման վրա մանրամասն հետազոտվել են ճառագայթման անկյունա-հաճախային բնութագրերը: Բերված են առաքված քվանտների թվի համար թվային հաշվարկների արդյունքները: Կատարված է համեմատություն վակուումում սինքրոտրոնային ճառագայթման ինտենսիվության հետ: Ցույց է տրված, որ խնդրի պարամետրերի որոշ արժեքների համար առաքված քվանտների անկյունային բաշխման մեջ ի հայտ են գալիս նեղ ուժեղ պիկեր:

RADIATION FROM AN ELECTRON  
ROTATING INSIDE A DIELECTRIC CYLINDER

A.S.KOTANJYAN, A.A.SAHARIAN

The radiation from a charged particle moving uniformly along the circle inside a dielectric cylinder is investigated. The radiation field at large distances from the cylinder is obtained. The formula is derived for the radiation intensity in the outside region. On the base of this formula the angular-frequency characteristics for the radiation are studied in detail. The results of the numerical evaluation are presented for the number of radiated quanta. A comparison with the intensity of the synchrotron radiation in the vacuum is carried out. It is shown that for certain values of the problem parameters there are narrow high peaks in the angular distribution of the radiation intensity.

УДК 539.2

## МЕТОД КОМПЛЕКСНОЙ АМПЛИТУДЫ РАССЕЯНИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Д.М. СЕДРАКЯН, А.Ж. ХАЧАТРЯН

Ереванский государственный университет

Государственный инженерный университет Армении

(Поступила в редакцию 29 октября 2001 г.)

Рассмотрено квантовомеханическое движение электрона в поле произвольного центрально-симметричного потенциала. Показано, что задача нахождения парциальных волн для волновой функции электрона, рассеивающегося на потенциале, может быть сведена к решению радиального дифференциального уравнения Шредингера с начальными условиями. Для связанных электронных состояний найдено уравнение, определяющее их энергетический спектр. Показано, что если спектр связанных состояний известен, то задача нахождения волновой функции связанных состояний также сводится к задаче решения уравнения Шредингера с заданными начальными условиями. Проведено также обобщение предложенного подхода для движения электрона в поле произвольного потенциала с цилиндрической симметрией.

### 1. Введение

Задачи одноканального рассеяния электрона и нахождения спектра связанных состояний для локальных потенциалов произвольного вида являются одними из центральных задач квантовой механика [1]. Как известно, особо важны эти задачи в атомной физике и в физике атомного ядра [1-3]. Однако в последнее время наблюдается повышенный интерес к задачам данного класса в физике твердого тела. Это связано с возросшими возможностями нанотехнологии по созданию систем со всевозможными встроенными потенциалами, связанными с характером модуляции краев валентной зоны и зоны проводимости в объеме структуры. Последнее достигается путем композиции двух или нескольких структурных элементов, или же неоднородной степенью легирования одного элемента внутри его объема [4-8].

В настоящее время в связи с задачами прикладного плана, а также причинами фундаментального характера возникла необходимость изучения физических явлений в плоских (квазидвумерных) [9,10], цилиндрических (квазиодномерных) [11-13] и сферических (квазинульмер-

ных) [14,15] квантовых ямах, связанных с поведением квазичастиц и их взаимодействием. В отличие от потенциалов, рассматриваемых в ядерной физике, которые имеют заранее заданный вид, современные технологии выращивания полупроводниковых наноструктур, благодаря широкой вариации параметров композиционных материалов структуры, сделали возможным создание искусственных потенциалов с наперед заданными структурными характеристиками [16].

В связи с вышесказанным представляет интерес рассмотрение движения квантовой частицы в поле одномерного потенциала произвольного вида, а также в произвольных потенциальных полях, обладающих цилиндрической и сферической симметриями. Задача одномерного движения электрона в общем виде рассмотрена в работах [17,18], где показано, что задача нахождения волновых функций как финитного, так и инфинитного стационарных движений, а также спектра связанных состояний может быть сформулирована как задача Коши для одномерного уравнения Шредингера. В данной работе мы развиваем подход, аналогичный подходу, развитому в [17,18], для рассмотрения движения электрона в произвольном поле, обладающем центральной симметрией.

Кроме стандартного метода, изложенного в учебниках по квантовой механике для рассмотрения движения электрона в поле центрально-симметричного потенциала, заслуживает внимания метод фазовых функций, предложенный примерно 35 лет тому назад [19,20]. В этом методе предлагается вместо решения уравнения Шредингера для парциальной волновой функции рассматривать уравнение для фазовой функции, которое является нелинейным уравнением типа Риккати. Важным положительным элементом данного подхода, основанным на методе инвариантного погружения, впервые предложенном В.А.Амбарцумяном [21], является сведение граничной задачи для уравнения Шредингера к задаче Коши для фазового уравнения. Вместе с тем, основным недостатком этого подхода по сравнению со стандартным методом является то, что рассматриваемые в нем уравнения являются нелинейными. Последнее обстоятельство затрудняет решение задачи и лишает возможности использования известных теорем и методов теории линейных дифференциальных уравнений.

Цель данной работы – показать, что может быть предложен новый подход – метод комплексной амплитуды рассеяния, который позволяет, как и метод фазовых функций, свести рассматриваемую задачу к задаче Коши, однако предлагаемые здесь уравнения являются линейными. Как мы покажем ниже, квантовомеханическая задача движения частицы в произвольном центрально-симметричном поле может быть сведена к задаче интегрирования двух линейных дифференциальных уравнений первого порядка с заданными начальными условиями.

## 2. Уравнения для действительной и мнимой частей амплитуды рассеяния

Как известно, волновая функция частицы  $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \exp\{-i/\hbar Et\}$ , совершающей стационарное движение в поле центрально-симметричного потенциала  $u(\mathbf{r}) \equiv u(r)$ , может быть представлена как суперпозиция парциальных волн:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \sum_{l, m} \frac{u_l(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (1)$$

где  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  есть известные сферические функции, а функция  $u_l(r)$  удовлетворяет следующему уравнению:

$$\frac{d^2 u_l(r)}{dr^2} + \left[ k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - V(r) \right] u_l(r) = 0, \quad (2)$$

где  $k^2 = 2m/\hbar^2 E$  и  $V(r) = 2m/\hbar^2 u(r)$ . При  $V(r) = 0$  двумя линейно независимыми решениями уравнения (2) являются функции  $h_l^{(1)}$  и  $h_l^{(2)}$ , выражающиеся через функции Ганкеля полуцелого порядка следующим образом:

$$h_l^{(1)}(x) = \sqrt{\frac{\pi x}{2}} H_{l+1/2}^{(1)}(x), \quad h_l^{(2)}(x) = \sqrt{\frac{\pi x}{2}} H_{l+1/2}^{(2)}(x), \quad (3)$$

где  $x = kr$ . Эти функции могут быть представлены также в виде линейной комбинации функций Риккати – Бесселя:  $h_l^{(1)}(x) = j_l(x) + in_l(x)$  и  $h_l^{(2)}(x) = j_l(x) - in_l(x)$ , где  $j_l(x)$  и  $n_l(x)$  связаны с функциями Бесселя и Неймана полуцелого порядка:

$$j_l(x) = \sqrt{\frac{\pi x}{2}} J_{l+1/2}(x), \quad n_l(x) = \sqrt{\frac{\pi x}{2}} N_{l+1/2}(x). \quad (4)$$

При  $V(r) \neq 0$  действительное решение уравнения (2) будем искать в виде

$$u_l(r) = 1/2 [A_l(r) h_l^{(1)}(kr) + A_l^*(r) h_l^{(2)}(kr)], \quad (5)$$

где  $A_l(r)$  – комплексная амплитуда рассеяния. Выражая в (5)  $h_l^{(1)}(kr)$ ,  $h_l^{(2)}(kr)$  через  $j_l(kr)$ ,  $n_l(kr)$ , для  $u_l(r)$  получим следующее выражение:

$$u_l(r) = a_l(r) j_l(kr) - b_l(r) n_l(kr), \quad (6)$$

где введены обозначения

$$a_l(r) = \text{Re } A_l(r), \quad b_l(r) = \text{Im } A_l(r), \quad (7)$$

которые являются действительной и мнимой частями комплексной амплитуды рассеяния  $A_l(r)$ .

Продифференцируем выражение (6) по  $r$  и потребуем выполнения условия

$$j_l(kr) \frac{da_l(r)}{dr} = n_l \frac{db_l(r)}{dr}. \quad (8)$$

Тогда

$$\frac{du_l(r)}{dr} = a_l(r) \frac{dj_l(kr)}{dr} - b_l(r) \frac{dn_l(kr)}{dr}. \quad (9)$$

Из (8)-(9) для определения функций  $a_l(r)$  и  $b_l(r)$  получим следующую систему линейных дифференциальных уравнений первого порядка:

$$\begin{aligned} \frac{da_l(r)}{dr} &= -\frac{V(r)n_l(kr)}{k} [a_l(r)j_l(kr) - b_l(r)n_l(kr)], \\ \frac{db_l(r)}{dr} &= -\frac{V(r)j_l(kr)}{k} [a_l(r)j_l(kr) - b_l(r)n_l(kr)]. \end{aligned} \quad (10)$$

Из уравнений (10) видно, что в областях со значением потенциала  $V(r) = 0$  функции  $a_l(r)$  и  $b_l(r)$  принимают постоянные значения. В рамках изложенного подхода, вместо решения уравнения Шредингера предлагается решить систему уравнений (10).

В работах [19,20] предлагается вместо функций  $a_l(r)$  и  $b_l(r)$ , которые, как было отмечено, являются действительной и мнимой частями комплексной амплитуды рассеяния, определять амплитуду и фазу этой функции:  $A_l(r) = |A_l(r)| \exp\{i\delta_l(r)\}$ . Однако уравнения, которым удовлетворяют функции  $\delta_l(r)$  и  $|A_l(r)|$ , удовлетворяют нелинейным уравнениям Риккати. На наш взгляд, такое предложение не конструктивно, так как знание функций  $a_l(r)$  и  $b_l(r)$ , которые являются решениями линейных уравнений, непосредственно определяет как фазу, так и модуль комплексной амплитуды рассеяния:

$$|A_l(r)| = \sqrt{a_l^2(r) + b_l^2(r)}, \quad \text{tg } \delta_l(r) = b_l(r) / a_l(r). \quad (11)$$

С другой стороны, стандартный подход для определения комплексной амплитуды рассеяния опирается на решения уравнения Шредингера (2) для определения радиальной волновой функции  $u_l(r)$ . Согласно (9) и (11),  $a_l(r)$  и  $b_l(r)$  могут быть выражены через функции  $u_l(r)$  и их производные следующим образом:

$$a_l(r) = \frac{1}{k} \left[ u_l(r) \frac{dn_l(r)}{dr} - n_l(r) \frac{du_l(r)}{dr} \right], \quad (12)$$

$$b_l(r) = \frac{1}{k} \left[ u_l(r) \frac{dj_l(r)}{dr} - j_l(r) \frac{du_l(r)}{dr} \right]. \quad (13)$$

Тогда знание  $u_l(r)$  определяет  $\delta_l(r)$  и  $|A_l(r)|$  согласно (12), (13).

### 3. Метод погружения и начальные условия для функций $a_l(r)$ , $b_l(r)$ , $u_l(r)$

В работах [19,20] было показано, что амплитуда рассеяния  $A_l(r)$  как функция от  $r$  может быть интерпретирована как амплитуда рассеяния для последовательно обрезанных потенциалов (метод погружения):

$$V(r, R) = V(r)\theta(R-r), \quad \theta(x > 0) = 1 \text{ и } \theta(x < 0) = 0. \quad (14)$$

Соотношения (8), (9) обеспечивают непрерывность волновой функции во всех точках. Заметим, что функции  $a_l(r)$  и  $b_l(r)$  при  $r > R$  принимают постоянные значения  $a_l(r)$  и  $b_l(r)$ . Согласно вышесказанному, с учетом (7),  $a_l(r)$  и  $b_l(r)$  определяют фазу и амплитуду волновой функции для последовательности «обрезанных» потенциалов различного радиуса действия (14).

Из такой постановки задачи следует, что система уравнений (12), (13) должна решаться с некоторыми заданными в точке  $r=0$  начальными условиями для функций  $a_l(r)$  и  $b_l(r)$ . Заметим, что условие  $R=0$  соответствует полному отсутствию взаимодействия. Начальные условия для функции  $a_l(r)$  и  $b_l(r)$  зависят от поведения  $V(r)$  на малых расстояниях. В связи с этим рассмотрим следующие два случая.

Первый случай: потенциал несингулярен или слабо сингулярен, т.е.

$$r^2 V(r) \rightarrow 0 \text{ при } r \rightarrow 0, \quad (15)$$

для которого начальные условия задаются в некоторой точке  $r=r_0$  в виде

$$a_l(r_0) = 1 \text{ и } b_l(r_0) = 0, \quad (16)$$

где  $r_0$  должно быть выбрано согласно условию  $V(r_0)r_0^2 \ll 1$ .

Второй случай: сильно сингулярный отталкивающий потенциал

$$r^2 V(r) \rightarrow \infty \text{ при } r \rightarrow 0, \quad (17)$$

для которого начальные условия принимают вид

$$a_l(r_0) = 1 \text{ и } b_l(r_0) = j_l(r_0)/n_l(r_0) - k n_l^{-2}(r_0)/\sqrt{V(r_0)}, \quad (18)$$

где точка  $r=r_0$  должна быть выбрана согласно условию

$$r_0 \sqrt{V(r_0)} \gg 2l+1. \quad (19)$$

Как было отмечено выше, функции  $a_l(r)$  и  $b_l(r)$  связаны с волновой функцией согласно формулам (12), (13). Данная связь позволяет сформулировать рассматриваемую задачу как задачу Коши непосредственно для волнового уравнения (2). Будем искать решения уравнения (2) в виде

$$u_l(r) = C_l H_l^1(r) + D_l H_l^2(r), \quad (20)$$

где  $H_l^1(r)$  и  $H_l^2(r)$  являются его двумя линейно независимыми решениями, удовлетворяющими начальным условиям

$$H_l^1(r_0) = 1, \quad dH_l^1(r_0)/dr = 0 \quad \text{и} \quad H_l^2(r_0) = 0, \quad dH_l^2(r_0)/dr = 1. \quad (21)$$

Постоянные  $C_l$  и  $D_l$  в (20) для двух рассмотренных выше случаев (15), (17) должны быть выбраны следующим образом:

$$C_l = j_l(r_0), \quad B_l = dj_l(r_0)/dr \quad \text{при} \quad V(r_0)r_0^2 \ll 1, \quad (22)$$

$$C_l = -kn_l^{-1}(r_0)\sqrt{V(r_0)}, \quad D_l = -kn_l^{-1}(r_0) \quad \text{при} \quad r_0\sqrt{V(r_0)} \gg 2l+1. \quad (23)$$

Отметим, что знание функций  $H_l^1(r)$  и  $H_l^2(r)$  для произвольного  $r$  определяет волновую функцию во всем пространстве (см. (20)). Так как  $H_l^1(r)$  и  $H_l^2(r)$  определяются согласно задаче Коши (21) для волнового уравнения (2), то, следовательно, задача нахождения волновой функции также сводится к задаче Коши для уравнения (2).

#### 4. Волновая функция и спектр связанных состояний электрона в поле произвольного центрально-симметричного потенциала

В п.3 мы рассмотрели задачу определения волновой функции электрона, совершающего инфинитное движение в поле произвольного центрально-симметричного потенциала. Рассмотрим теперь случай финитного движения. Пусть потенциал задан на конечном интервале  $0 < r < R$ , вне которого ( $r > R$ ) потенциал равен нулю. Если энергия электрона отрицательна, тогда он находится в связанном состоянии. Найдем волновые функции и энергетический спектр связанных состояний. Будем искать волновую функцию в следующем виде:

$$\phi(r) = \begin{cases} L_l u_l(r), & r < R, \\ M_l k_l(\chi r), & r > R, \end{cases} \quad (24)$$

где  $\chi = \sqrt{|E|}$ . Условие непрерывности волновой функции и ее производных в точке  $r = R$  определяет спектр связанных состояний

$$\frac{u_l'(r)}{u_l(r)} = \frac{k_l'(\chi R)}{k_l(\chi R)} \quad \text{и} \quad M_l = \frac{u_l'(R)}{k_l(\chi R)} L_l. \quad (25)$$

Выбирая нормировочную константу  $L_l$  из условия нормировки, получим

$$L_l = \left[ \int_0^\infty \left( u_l^2(r) + \frac{u_l'(R)}{k_l'(R)} k_l(\chi r) \right)^2 \right]^{-1/2}. \quad (26)$$

Предположим теперь, что внутри интервала  $0 < r < R$  между точ-

ками  $r_1$ ,  $r_2$  потенциал задан в виде произвольной функции  $V(r)$ , а в интервалах  $0 < r < r_1$  и  $r_2 < r < R$  принимает постоянное отрицательное значение  $-V_0$  ( $V_0 > 0$ ). В этом случае волновая функция связанного состояния принимает вид

$$\phi(r) = \begin{cases} A_1 j_l(kr), & r < r_1, \\ A_2 H_l^1(r) + B_2 H_l^2(r), & r_1 < r < r_2, \\ A_3 j_l(kr) + B_3 n_l(kr), & r_2 < r < R, \\ A_4 k_l(\chi r), & r > R, \end{cases} \quad (27)$$

где  $k = \sqrt{V_0 - |E|}$ . Функции  $H_l^1(r)$ ,  $H_l^2(r)$  являются решениями уравнения Шредингера с начальными условиями (21), заданными в точке  $r_0 = r_1$ . Условия непрерывности волновой функции и ее производной в точках  $r_1$ ,  $r_2$  и  $R$  дают нам систему из шести уравнений для коэффициентов функции  $\phi(r)$   $A_1, A_2, A_3, A_4, B_2, B_3$ . Так как эта система однородна, то для ее разрешения необходимо потребовать равенства нулю ее детерминанта. Последнее условие приводит к следующему уравнению, определяющему энергетический спектр связанных состояний:

$$\frac{[u_l(r), j_l(kr)]|_{r=r_2}}{[u_l(r), n_l(kr)]|_{r=r_2}} = \frac{[k_l(\chi r), j_l(kr)]|_{r=R}}{[k_l(\chi r), n_l(kr)]|_{r=R}}, \quad (28)$$

где введены обозначения

$$u_l(r) = j_l(kr_1)H_l^1(r) + dj_l(kr_1)/dr H_l^2(r), \quad [A, B] = A dB/dx - B dA/dx. \quad (29)$$

Неизвестные коэффициенты  $A_2, A_3, A_4, B_2, B_3$  связаны с коэффициентом  $A_1$  согласно формулам

$$A_2 = j_l(kr_1)A_1, \quad B_2 = \frac{dj_l(kr_1)}{dr} A_1, \quad A_3 = \frac{A_1}{k} [u_l(r), n_l(kr)]|_{r=r_2},$$

$$B_3 = -\frac{A_1}{k} [u_l(r_2), j_l(kr_2)], \quad B_4 = \frac{[u_l(r_2), n_l(kr_2)]}{[k_l(\chi R), n_l(kR)]} A_1. \quad (30)$$

Неизвестная константа  $A_1$  в (30) определяется из условия нормировки волновой функции  $\phi_l(r)$ :

$$A_1 = \left\{ \int_0^{r_1} j_l^2(kr) dr + \int_{r_1}^{r_2} u_l^2(r) dr + \frac{1}{k^2} \int_{r_2}^R (j_l(kr)[u_l(r_2), n_l(kr_2)] - n_l(kr)[u_l(r_2), j_l(kr_2)])^2 dr + \int_0^\infty \left( \frac{[u_l(r_2), n_l(kr_2)]}{[k_l(\chi r_2), n_l(kr_2)]} k_l(\chi r) \right)^2 dr \right\}^{-1/2}. \quad (31)$$

Отметим, что в (30), (31) предполагается, что  $k$  соответствует энергиям связанных состояний ( $k \equiv k_n = \sqrt{E_n}$ ), которые определяются из уравнения (28).

## 5. Движение электрона в произвольном потенциальном поле с цилиндрической симметрией

Подход для рассмотрения движения электрона в поле с цилиндрической симметрией во многом аналогичен подходу для случая центрально-симметричного поля, который был изложен выше. Поэтому мы ограничимся только приведением окончательных результатов.

Как известно, если потенциал аксиальный, то в цилиндрической системе координат можно произвести разделение переменных в уравнении Шредингера:

$$\psi(\rho, \varphi, z) = \exp\{ik_z z\} \sum_{m=-\infty}^{\infty} u_m(\rho) \exp\{im\varphi\}, \quad (32)$$

где радиальная волновая функция удовлетворяет уравнению

$$\left[ \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \left( k^2 - \frac{m^2}{\rho^2} - V(\rho) \right) \right] U_m(\rho) = 0. \quad (33)$$

В (32)  $k^2$  есть энергия движения электрона в плоскости  $\rho, \varphi$  ( $E - k_z^2 = k^2$ ,  $E$  — полная энергия электрона).

При  $V(\rho) = 0$  двумя линейно независимыми решениями уравнения (33) являются функции Ганкеля  $H_m^{(1)}(k\rho)$  и  $H_m^{(2)}(k\rho)$ , которые связаны с действительными функциями Бесселя-Неймана  $J_m(k\rho)$  и  $N_m(k\rho)$  следующим образом:

$$H_m^{(1)}(k\rho) = J_m(k\rho) + iN_m(k\rho), \quad H_m^{(2)}(k\rho) = J_m(k\rho) - iN_m(k\rho). \quad (34)$$

В случае, когда  $V(\rho) \neq 0$ , будем искать общее решение уравнения (33) в виде

$$U_m(\rho) = \frac{1}{2} \left[ A_m(\rho) H_m^{(1)}(k\rho) + A_m^*(\rho) H_m^{(2)}(k\rho) \right] \quad (35)$$

и назовем  $A_m(\rho)$  комплексной амплитудой рассеяния.

Используя (34), для (35) получим:

$$U_m(\rho) = a_m(\rho) J_m(k\rho) + b_m(\rho) N_m(k\rho), \quad (36)$$

где  $a_m(\rho) = \text{Re } A_m(\rho)$  и  $b_m(\rho) = \text{Im } A_m(\rho)$ . Если потребовать, чтобы выполнялось равенство

$$\frac{dU_m(\rho)}{d\rho} = a_m(\rho) \frac{dJ_m(\rho)}{d\rho} + b_m(\rho) \frac{dN_m(\rho)}{d\rho}, \quad (37)$$

то, аналогично случаю сферически-симметричного потенциала,  $a_m(\rho)$  и  $b_m(\rho)$  в произвольной точке  $\rho'$  будут равны действительной и мнимой части комплексной амплитуды рассеяния для обрезаемого потенциала

$$V(\rho, \rho') = V(\rho)\theta(\rho' - \rho).$$

Используя (33), (36), (37) для определения функций  $a_m(\rho)$ ,  $b_m(\rho)$ , можно получить следующую систему линейных дифференциальных уравнений:

$$\frac{da_m(\rho)}{d\rho} = -\frac{\pi}{2} \rho V(\rho) N_m(k\rho) (a_m(\rho) J_m(k\rho) - b_m(\rho) N_m(k\rho)), \quad (38)$$

$$\frac{db_m(\rho)}{d\rho} = -\frac{\pi}{2} \rho V(\rho) J_m(k\rho) (a_m(\rho) J_m(k\rho) - b_m(\rho) N_m(k\rho)). \quad (39)$$

Для нахождения начальных условий для уравнений (38), (39) необходимо исследовать поведение решения вблизи точки  $\rho=0$ . Из (36), (37) выразим функции  $a_m(\rho)$ ,  $b_m(\rho)$  через  $U_m(\rho)$ ,  $dU_m(\rho)/d\rho$  следующим образом:

$$a_m(\rho) = [U_m(\rho), N_m(k\rho)] \text{ и } b_m(\rho) = [U_m(\rho), J_m(k\rho)]. \quad (40)$$

Следуя работе [20], здесь мы приводим начальные условия для двух случаев.

Потенциал является несингулярным или слабо сингулярным:

$$\rho^p V(\rho) \leq \theta(1/\ln^2 \rho), \quad \rho \rightarrow 0 \quad (41)$$

при  $p > 0$  для любого  $m$  или же при  $0 < p < 2$  при  $m > 0$ . Интегрирование (38), (39) должно производиться начиная с точки  $\rho_0$  с условиями  $a_m(\rho_0) = 1$  и  $b_m(\rho_0) = 0$ , где  $\rho_0$  определяется согласно неравенству  $V(\rho_0)\rho_0^2 \ll 1/(N_m(k\rho_0)J_m(k\rho_0))^2$ . Используя (40), для интегрирования уравнения Шредингера получим следующие начальные условия:

$$U_m(\rho_0) = J_m(k\rho_0) \text{ и } dU_m(\rho_0)/d\rho = dJ_m(k\rho_0)/d\rho. \quad (42)$$

Потенциал является сильно сингулярным, когда он имеет вид (41) при  $0 < p < 2$  для  $m=0$  и в случае

$$V(\rho)\rho^2 \rightarrow 0, \quad \rho \rightarrow 0, \quad (43)$$

для любого  $m$ . В этом случае начальные условия для уравнений (38), (39) имеют вид  $a_m(\rho_0) = 1$ ,  $b_m(\rho_0) = J_m(k\rho_0)/N_m(k\rho_0) - 2/(\pi\rho_0 V(\rho_0))^{-1/2} N_m^2(k\rho_0)$ , где  $\rho_0$  определяется согласно неравенству  $V(\rho_0)\rho_0^2 \gg \gg 1/(N_m(k\rho_0)J_m(k\rho_0))^2$ . Тогда начальные условия для интегрирования уравнения Шредингера примут вид

$$U_m(\rho_0) = \frac{2V(\rho_0)^{-1/2}}{\pi\rho_0 N_m(\rho_0)} \text{ и } \frac{dU_m(\rho_0)}{d\rho} = \frac{2}{\pi\rho_0 N_m(k\rho_0)}. \quad (44)$$

Будем искать решение уравнения Шредингера (33) в виде

$$U_m(\rho) = C_m H_m^1(\rho) + D_m H_m^2(\rho). \quad (45)$$

Тогда в (44)  $H_m^1(\rho)$  и  $H_m^2(\rho)$  могут быть рассмотрены как линейно независимые решения уравнения Шредингера, удовлетворяющие начальным условиям

$$H_m^1(\rho_0) = 1, \quad dH_m^1(\rho_0)/d\rho = 0, \quad H_m^2(\rho_0) = 0, \quad dH_m^2(\rho_0)/d\rho = 1 \quad (46)$$

и

$$C_m = U_m(\rho_0), \quad D_m = dU_m(\rho_0)/d\rho. \quad (47)$$

Здесь  $U_m(\rho_0)$ ,  $dU_m(\rho_0)/d\rho$  определяются согласно (42) и (44).

Рассмотрим теперь задачу определения энергетического спектра и волновых функций электрона, когда потенциал задан внутри интервала  $0 \leq \rho \leq \rho'$  и вне которого он равен нулю. Если энергия электрона отрицательна, то волновая функция связанного состояния имеет вид

$$\phi_m(\rho) = \begin{cases} L_m U_m(\rho), & \rho \leq \rho', \\ M_m K_m(\chi\rho), & \rho \geq \rho', \end{cases} \quad (48)$$

где  $\chi = \sqrt{|E|}$ . Условие непрерывности волновой функции и ее производной в точке  $\rho = \rho'$  определяет энергетический спектр электрона и связывает константы  $L_m$  и  $M_m$ :

$$\frac{U'_m(\rho')}{U_m(\rho')} = \frac{K'_m(\chi\rho')}{K_m(\chi\rho')} \quad \text{и} \quad M_m = \frac{U'_m(\rho')}{U_m(\rho')} L_m. \quad (49)$$

Отметим также, что можно рассмотреть задачу определения электронного спектра и волновых функций для неоднородной квантовой нити с потенциалом, аналогичным потенциалу неоднородной квантовой точки (см. (4)). Как показывает рассмотрение, получаемые при этом решения, константы, входящие в волновую функцию, а также уравнение, определяющее энергетический спектр, имеют форму, аналогичную формулам (24)-(27), соответственно, где  $j_l(\chi r)$ ,  $n_l(\chi r)$ ,  $k_l(\chi r)$  заменены на  $J_l(\chi r)$ ,  $N_l(\chi r)$ ,  $K_l(\chi r)$ .

В заключение отметим, что полученные результаты будут применены для исследования энергетического спектра и волновых функций электрона в низкоразмерных системах с заданным видом потенциала, реализованным экспериментально.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Квантовая механика. М., Наука, 1974.
2. И.И.Гуревич, Л.А.Тарасов. Физика нейтронов низких энергий. М., Наука, 1965.
3. Дж.Тейлор. Теория рассеяния. М., Мир, 1974.
4. М.Херман. Полупроводниковые сверхрешетки. М., Мир, 1989.
5. L.Esaki, R.Tsu. IBM J. Res. Dev., **14**, 61, (1970).
6. Ю.А.Романов. ФТП, **4**, 1434 (1971).
7. H.C.Liu. J.Appl. Phys., **73**, 3062 (1993); B.F.Levine, J.Appl. Phys., **74**, R1 (1993).

8. H.Akayama, H.Sugavara, Y.Kodoya. A.Lorke, S.Trujino, H.Sakaki. Appl. Phys. Lett., 65, 424 (1994).
9. N.Mori, T.Ando. Phys. Rev., B40, 6175 (1989).
10. J.M.Rosison. Phys. Rev., B48, 4643 (1994).
11. M.M.Agasyan and A.A.Kirakosyan. Physica E, 8, 281 (2000).
12. R.R.L.De Carvalho, J.R.Filho, G.A.Farias, V.N.Freire. Super. and Microstructures, 25, 221 (1999).
13. Н.В.Ткач, И.В.Пронишин, А.М.Маханец. ФТТ, 40, 577 (1998).
14. D.Schooss, A.Mews, A.Eychmuller, H. Weller. Phys. Rev., B49, 17072 (1994).
15. J.Kim, Lin-Wang Wang, A.Zuger. Phys. Rev., B56, 15541 (1997).
16. G.Bastard. Wave mechanics applied to the semiconductor heterostructures. Paris, Les Ulis, 1989.
17. D.M.Sedrakian and A.Zh.Khachatrian. Phys. Lett., A265, 294 (2000).
18. Д.М.Седракиян, А.Ж.Хачатрян. Изв. НАН Армении, Физика 36, 62 (2001); 36, 241 (2001).
19. G.Calogero. Variable phase approach in potential scattering. N.Y. & London, Acad. Press, 1967.
20. В.В.Бабигов. УФН, 92, 3 (1967).
21. В.А.Амбарцумян. ДАН СССР, 38, 8 (1943).

ՑՐԱՆ ԿՈՄՊԼԵՔՍ ԱՄՊԼԻՏՈՒԴԻ ՄԵԹՈՂԸ  
ԲՎԱՆՏԱՅԻՆ ՄԵԽԱՆԻԿԱՅԻՆՈՒՄ

Գ.Մ.ՍԵՂՐԱԿՅԱՆ, Ա.Ճ.ԽԱՉԱՏՐՅԱՆ

Դիտարկված է էլեկտրոնի շարժման նկարագրման խնդիրը կամայական կենտրոնահամաչափ պոտենցիալային դաշտում: Ցույց է տրված, որ ալիքային ֆունկցիայի պարզիալ ալիքների որոշման խնդիրը կարելի է բերել Կոշիի խնդրի ռադիալ Շրեդինգերի հավասարման համար: Էլեկտրոնի կապված վիճակների համար ստացված է նրանց էներգիական սպեկտրը որոշող հավասարում: Ցույց է տրված, որ եթե կապված վիճակների սպեկտրը հայտնի է, ապա կապված վիճակների ալիքային ֆունկցիաների որոշման խնդիրը նորից բերվում է Շրեդինգերի հավասարման լուծմանը տրված սկզբնական պայմանների համար: Կատարված է նաև առաջարկված մոտեցման ընդհանրացումը կամայական զրամահամաչափ պոտենցիալային դաշտում էլեկտրոնի շարժման համար:

METHOD OF COMPLEX SCATTERING AMPLITUDE  
IN QUANTUM MECHANICS

D.M. SEDRAKIAN, A.ZH. KHACHATRIAN

The problem of description of the electron motion in the field of an arbitrary central-symmetric potential is considered. It is shown that the problem of finding the partial waves of the wave function can be reduced to the Cauchy problem for the radial Schroedinger wave equation. The equation determining the energy spectrum for bound electron states is found. It is also shown that, if the spectrum of the bound states is known, the problem of determination of bound states is also reduced to the problem of solution of the Schroedinger equation with given initial conditions. Generalization of the approach for the electron motion in an arbitrary cylindrical-symmetric potential field is also performed.

УДК 532.52

## СВЕРХФОКУСИРОВКА ПОВЕРХНОСТНОГО ПЛАЗМОН-ПОЛЯРИТОНА В КЛИНООБРАЗНОЙ СТРУКТУРЕ

Н.А. ДЖАНУНЦ

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 7 февраля 2002 г.)

Показано, что при распространении поверхностного плазмон-поляритона через клинообразную структуру его длина волны существенно уменьшается. В результате создаются благоприятные условия для локализации волны в очень малой области пространства, где напряженность электрического поля аномально возрастает.

### 1. Введение

При изучении нелинейных оптических эффектов на поверхности металла было обнаружено, что шероховатость поверхности способствует возрастанию нелинейного сигнала [1]. Оказалось, что этот эффект в максимальной мере проявляется, когда шероховатость имеет нанометрические размеры [2]. В работах [3,4] сделано предположение, что возрастание электромагнитного поля волны обусловлено возбуждением поверхностного плазмон-поляритона (ППП). Это предположение подтверждается в работах [5-9], где показано, что при определенных условиях из-за сверхфокусировки ППП аномально возрастают волновые поля.

В [5] показано, что в процессе распространения ППП через металлическую клинообразную структуру, находящуюся в однородной диэлектрической среде, существуют необходимые условия для сильной локализации волны и аномального возрастания ее электрического поля. В настоящей работе будет показано, что такое поведение ППП будет наблюдаться и в "асимметричном" случае, т.е. когда клин расположен между двумя различными средами. Примечательно, что эффект сверхфокусировки ППП будет наблюдаться даже в том случае, если металлом является не клин, а одна из окружающих его сред.

### 2. Теория

Рассмотрим клинообразную структуру, состоящую из трех различных сред (рис.1). Исследуем возможность сверхфокусировки ППП в окрестности конца клина, когда угол клина  $\alpha \ll 1$ . Будем использовать ци-

линдрическую систему координат  $r, \varphi, z$  (см. рис.1). Здесь координата  $z$  направлена по концу клина. Полагаем, что клин с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_2$  занимает область  $\pi - \alpha < \varphi < \pi$ , подложка с  $\varepsilon_3$  занимает область  $\pi < \varphi < 2\pi$ , а остальную часть пространства ( $0 < \varphi < \pi - \alpha$ ) занимает диэлектрик с проницаемостью  $\varepsilon_1$ . Считаем также, что отлична от нуля лишь  $z$ -компонента магнитного поля волны  $H_z$ . Тогда волновые уравнения можно представить в следующем виде:

$$\frac{\partial^2 H_{zj}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial H_{zj}}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 H_{zj}}{\partial \varphi^2} + \varepsilon_j \frac{\omega^2}{c^2} H_{zj} = 0; \quad j=1,2,3. \quad (1)$$

Здесь  $\omega$  – частота волны,  $c$  – скорость света. Для того, чтобы изучить особенности волновых полей в непосредственной окрестности точки соприкосновения, представим независимую от времени часть  $H_z$  в виде

$$H_z(r, \varphi) = R(r)\phi(\varphi). \quad (2)$$

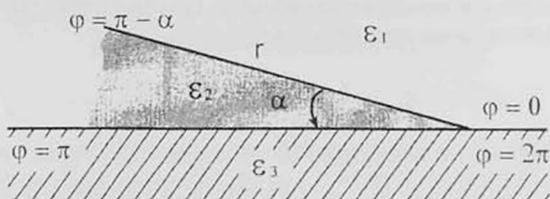


Рис.1. Поперечное сечение клинообразной структуры, где происходит сверхфокусировка поверхностного плазмон-поляритона.

Стандартным образом разделяя переменные, получим:

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dR(r)}{dr} + \frac{\eta^2}{r^2} R(r) = 0, \quad (3)$$

$$\frac{d^2 \phi(\varphi)}{d\varphi^2} - \eta^2 \phi(\varphi) = 0. \quad (4)$$

Здесь  $\eta$  – компонента разделения, которая определяется из граничных условий.

В непосредственной окрестности точки соприкосновения, когда

$$\frac{\eta^2}{r^2} \gg |\varepsilon| \frac{\omega^2}{c^2}, \quad (5)$$

для радиальной части волнового поля из (3) легко можно получить:

$$R(r) = \exp\left(i\eta \ln \frac{r}{r_0}\right) = \exp\left(i \int_{r_0}^r k(r') dr'\right), \quad k(r') = \frac{\eta}{r'}, \quad (6)$$

где  $r_0$  – постоянная величина, которая определяется способом возбуждения поверхностного поляритона.

Для угловой части волнового поля поверхностного поляритона получим:

$$\phi(\varphi) = Fe^{-\eta(\varphi-\pi)} + Ee^{\eta(\varphi-\pi)}; \quad \pi - \alpha \leq \varphi \leq \pi, \quad (7)$$

Из уравнений Максвелла можно определить компоненты напряженности электрического поля волны:

$$E_r = \frac{ic}{\omega r \varepsilon} R(r) \frac{\partial \phi(\varphi)}{\partial \varphi} e^{-i\omega t}, \quad E_\varphi = \frac{ic}{\omega \varepsilon} \phi(\varphi) \frac{\partial R(r)}{\partial r} e^{-i\omega t}. \quad (8)$$

В частности, в промежуточной области  $\pi - \alpha \leq \varphi \leq \pi$  имеем:

$$E_r = \frac{ic\eta}{\omega r \varepsilon_2} (Ee^{\eta(\varphi-\pi)} - Fe^{-\eta(\varphi-\pi)}) \exp\left(i\eta \ln \frac{r}{r_0} - i\omega t\right), \quad (9)$$

$$E_\varphi = \frac{ic\eta}{\omega r \varepsilon_2} (Ee^{\eta(\varphi-\pi)} + Fe^{-\eta(\varphi-\pi)}) \exp\left(i\eta \ln \frac{r}{r_0} - i\omega t\right). \quad (10)$$

Таким образом, из (6), (9) и (10) следует, что по мере приближения ППП к концу клина ( $r \rightarrow 0$ ) электрическая компонента волнового поля аномально возрастает.

Значение  $\eta$  можно определить из условий непрерывности тангенциальных компонент полей (при условии  $\alpha \ll 1$ ):

$$\eta = -\frac{1}{2\alpha} \ln \frac{(\varepsilon_3 + \varepsilon_2)(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)}{(\varepsilon_3 - \varepsilon_2)(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}. \quad (11)$$

### 3. Обсуждение

Из полученных результатов можно заключить, что в клинообразной структуре происходит сверхфокусировка ППП, т.е. в ходе его распространения должны наблюдаться следующие особенности. Во-первых, по мере приближения к концу клина, согласно уравнению (6), волновой вектор поляритона возрастает по закону  $\eta/r$ , и, соответственно, уменьшается длина волны. Тогда дифракционные процессы не препятствуют локализации волны в очень малом участке пространства. В результате этого электрические поля аномально возрастают ( $E_r, E_\varphi \sim r^{-1}$ ).

В отличие от случая, описанного в [5], здесь сверхфокусировка ППП будет наблюдаться даже в том случае, когда металлом является не клин, а одна из окружающих его сред. Для этого необходимо, чтобы  $\varepsilon_3 < 0$  и  $\varepsilon_2 < |\varepsilon_3| < \varepsilon_1$ . Указанное обстоятельство существенно расширяет возможности экспериментального наблюдения эффекта.

## ЛИТЕРАТУРА

1. H.Reather. Surface Plasmons on Smooth and Rough Surfaces and on Gratings. Springer-Verlag, Berlin, 1988.
2. C.K.Chen, A.R.B.Castro, Y.R.Shen. Phys. Rev. Lett., **46**, 145 (1981).
3. G.T.Boyd, Th.Rasing, J.R.R.Leite, Y.R.Shen. Phys. Rev., B, **30**, 519 (1984).
4. R.T.Deck, R.K.Grygier. Appl. Opt., **23**, 3202 (1984).
5. Kh.V.Nerkararyan. Phys. Lett., A, **237**, 103 (1997).
6. N.A.Janunts, K.S.Bagdasaryan, and Kh.V.Nerkararyan. Phys. Lett., A, **269**, 257 (2000).
7. A.J.Babadjanyan, N.L.Margaryan, and Kh.V.Nerkararyan. J. Appl. Phys., **88**, 3785 (2000).
8. A.J.Babadjanyan, S.V.Harutyuyun, and Kh.V.Nerkararyan. SPIE, **4060**, 142 (2000).
9. A.A.Lalayan, K.S.Bagdasaryan, P.G. Petrosyan, Kh.V.Nerkararyan, J.B.Ketterson. J. Appl. Phys., **91**, 2965 (2002).

ՄԱԿԵՐԵՎՈՒԹԱՅԻՆ ՊԼԱՉՄՈՆ-ՊՈԼՅԱՐԻՏՈՆԻ ԳԵՐՖՈԿՈՒՄԱՅՈՒՄԸ  
ՍԵՊԱՉԵՎ ԿԱՌՈՒՅՎԱԾՔՈՒՄ

Ն.Ա. ԶԱՆՈՒՆՑ

Ցույց է տրված, որ տարածվելով սեպածն կառուցվածքով, մակերևութային պլազմոն-պոլարիտոնի ալիքի երկարությունը փոքրանում է սեպի ծայրին մոտենալուն զուգընթաց: Արդյունքում ալիքը լոկալիզանում է շատ փոքր տիրույթներում և նկատվում է էլեկտրական դաշտի լարվածության անոմալ աճ:

## SUPERFOCUSING OF A SURFACE PLASMON-POLARITON IN A WEDGE-LIKE STRUCTURE

N.A. JANUNTS

It is shown that during the propagation of a surface plasmon-polariton through a wedge-like structure its wavelength decreases as it approaches the edge of the structure. As a result, the wave focuses in a very small region and the electric field strength increases anomalously.

УДК 621.315

## ВЛИЯНИЕ КУЛОНОВСКОЙ ЩЕЛИ НА ТОНКУЮ СТРУКТУРУ КРАЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ ТИПА А<sup>III</sup>В<sup>V</sup> В УСЛОВИЯХ СЛАБОГО ЛЕГИРОВАНИЯ И СЛАБОЙ КОМПЕНСАЦИИ

С.Л. АРУТЮНЯН

Государственный инженерный университет Армении

Гюмрийский образовательный комплекс

(Поступила в редакцию 2 октября 2001 г.)

Предложена физически адекватная интерполяционная формула для плотности состояний носителей зарядов в слабо легированных и слабо компенсированных полупроводниках. Получено явное выражение коэффициента поглощения, обусловленного переходами электронов из валентной зоны в донорную зону. Исследовано влияние кулоновской щели на тонкую структуру края фундаментального поглощения.

## 1. Введение

Имеющиеся в настоящее время многочисленные теоретические работы доказывают, а экспериментальные факты прямо или косвенно подтверждают наличие кулоновской щели в плотности состояний носителей зарядов вблизи уровня Ферми в слабо легированных полупроводниках – как в двумерных, так и в трехмерных системах (см., напр., [1-8]).

В частности, в работе [3] показано, что благодаря дальнедействующему характеру кулоновского потенциала, плотность состояний  $g(\varepsilon)$  вблизи уровня Ферми  $\mu$  обращается в нуль по универсальному закону:

$$g(\varepsilon) = \frac{3}{\pi} \frac{\chi^3}{e^6} (\varepsilon - \mu)^2 = \frac{4n_D(\varepsilon - \mu)^2}{\varepsilon_D^3}, \quad (1)$$

где  $n_D$  – концентрация основных примесей – доноров,  $\varepsilon_D = e^2 / \chi R_D$  – энергия кулоновского взаимодействия на среднем расстоянии  $R_D = (4\pi n_D / 3)^{-1/3}$  между донорами,  $\chi$  – диэлектрическая проницаемость образца.

Аналитическое исследование функции  $g(\varepsilon)$  в широком интервале изменения  $\varepsilon$  связано со сложной многоэлектронной задачей, которую принципиально невозможно свести к одноэлектронной (см., напр., [4]). Поэтому для исследования структуры примесной зоны широко применяются различные приближенные методы, в том числе и метод числен-

ного моделирования (см. обзор [5]).

Исходя из результатов работ [1-3,5], можно утверждать, что в результате численных методов исследования структуры примесной зоны в настоящее время установлено:

1. Плотность состояний  $g(\varepsilon)$  всегда имеет два пика. Высокоэнергетический пик (в области  $\varepsilon > \mu$ ) связан с ионизированными донорами, а низкоэнергетический пик (в области  $\varepsilon < \mu$ ) соответствует заполненным донорам.

2. Между этими пиками и расположена кулоновская щель, причем вблизи уровня Ферми  $g(\varepsilon)$  стремится к нулю по закону (1).

3. В предельных случаях слабой  $K \rightarrow 0$  и сильной  $K \rightarrow 1$  компенсаций ширина кулоновской щели стремится к нулю ( $K = n_A / n_D$ ,  $n_A$  - концентрация акцепторов).

## 2. Интерполяционная формула для функции плотности состояний

Очевидно, что в условиях отсутствия строгой теории структуры примесной зоны при исследовании тех физических свойств образцов, которые определяются структурой этой зоны, необходимо иметь хотя бы интерполяционную формулу, адекватно описывающую свойства функции  $g(\varepsilon)$  в широком интервале изменения энергии  $\varepsilon$ .

В настоящей работе предлагается интерполяционная формула для функции  $g(\varepsilon)$ , пригодная для всей области изменения  $\varepsilon$ , которая далее применяется для исследования влияния кулоновской щели на тонкую структуру края фундаментального поглощения, возникающую из-за переходов электронов из валентной зоны в донорную зону.

Для изучения оптического поглощения в интересующей нас области частот (см. ниже) необходимо установить вид функции  $g(\varepsilon)$  в области  $\varepsilon \geq \mu$ . Легко убедиться, что в условиях слабого легирования и слабой компенсации в области  $\varepsilon \geq \mu$  удобно функцию  $g(\varepsilon)$  представить следующей формулой:

$$g(\varepsilon) = \frac{4(\varepsilon - \mu)^2}{\varepsilon_D^3} N_D \exp \left\{ -2 \frac{K^{1/3}}{\varepsilon_D} (\varepsilon - \mu) \right\}, \quad (2)$$

где подгоночный параметр  $2K^{-1/3} / \varepsilon_D$  подобран таким образом, чтобы удовлетворялось условие электронейтральности  $\int_{\mu}^{\infty} g(\varepsilon) d\varepsilon = n_A$ .

Легко убедиться, что функция типа (2) удовлетворяет всем требованиям пунктов 1-3, приведенных во введении.

Действительно, в области  $\varepsilon \geq \mu$  функция (2) принимает максимальное значение (высокоэнергетический пик) в точке, которая распо-

ложена на расстоянии  $\Delta_0$  от уровня Ферми, причем

$$\Delta_0 = \varepsilon_D K^{\frac{1}{3}}, \quad g_{\max}(\Delta_0) = \frac{4}{e^2} \frac{n_D}{\varepsilon_D} K^{\frac{2}{3}}, \quad (3)$$

где  $e = 2.7...$  – число Эйлера.

Вблизи уровня Ферми, в области  $(\varepsilon - \mu)/\varepsilon_D \ll 1$  после разложения в ряд экспоненты в формуле (2), последняя с точностью до квадратичного члена переходит в формулу (1).

Согласно [4], в случае слабой компенсации, т.е. при  $K \ll 1$ ,  $\mu = 0.61\varepsilon_D$ , а в области  $\varepsilon < \mu$  низкоэнергетический пик расположен в точке  $\varepsilon = E_D$  ( $E_D$  – энергия ионизации изолированного донора), причем

$$g_{\max}(E_D) = 4.17 \frac{N_D}{\sqrt{\pi} \varepsilon_D} K^{\frac{1}{4}}. \quad (4)$$

Тогда из (3) и (4) следует, что  $\mu \gg \Delta_0$  и  $g_{\max}(E_D) \gg g(\Delta_0)$ . Следовательно, можно утверждать, что величина  $\Delta_0$ , определяющаяся формулой (3) есть полуширина кулоновской щели. Численные оценки  $\Delta_0$  при разных степенях компенсации приведены в столбце 2 таблицы 1.

Таблица 1. Численные значения параметров  $\Delta_0$ ,  $\Lambda$ ,  $\Omega_{\max}$ ,  $\hbar\omega - I_0$  при разных степенях компенсации  $K$ .

$K$	$\Delta_0$ (мэВ)	$\Lambda$	$\Omega_{\max}$	$\hbar\omega_{\max} - I_0$ (мэВ)
0.1	0.928	0.135	1.125	$10 \cdot 10^{-4}$
0.01	0.43	0.292	1.25	$5.3 \cdot 10^{-4}$
0.001	0.2	0.629	1.475	$1.2 \cdot 10^{-4}$

Формула (3) и приведенные численные оценки  $\Delta_0$  свидетельствуют о том, что ширина щели в пределе слабой компенсации уменьшается. Кроме того, если учесть, что при таких предельных компенсациях высота пика  $g_{\max}(\Delta_0)$  стремится к нулю (см. (3)), то можно утверждать, что в таких условиях кулоновской щелью можно пренебречь. Это вполне соответствует выводам, приведенным в работах [4,5].

Отметим, что в [4] для кулоновской щели приводится выражение  $\Delta_0 = \varepsilon_D K^{1/2}$ , которое не совпадает с нашим результатом (см. (3)). Причиной несоответствия является различие исходных предположений. Если в [4] предполагается, что вдали от уровня Ферми  $g(\varepsilon) = \text{const}$ , то в нашем случае результат (3) является следствием учета поведения функции  $g(\varepsilon)$  в области  $\varepsilon \geq \mu$  установленными численными методами.

### 3. Тонкая структура коэффициента поглощения при переходах “валентная зона – примесная зона”

Наряду с другими современными экспериментальными методами

(туннельная спектроскопия 2D систем, VRH-спектроскопия [6-8]), одним из наиболее прямых способов обнаружения кулоновской щели является исследование тонкой структуры края фундаментального поглощения слабо легированных и слабо компенсированных полупроводников. Это связано с тем, что (как показано ниже) в предпороговой области частот частотная зависимость коэффициента поглощения определяется видом плотности состояний вблизи энергии Ферми.

Целью данного раздела является следующее: используя выражение плотности состояний (2), изучить тонкую структуру края фундаментального поглощения, которая формируется при переходах "валентная зона – примесная зона".

Если считать закон дисперсии валентной зоны изотропным и квадратичным, то для исходного состояния будем иметь

$$\varepsilon_i = -\frac{\Delta}{2} - \frac{p^2}{2m_v}, \quad \Psi_i = U_{vp}(\mathbf{r}) \exp\left(i \frac{\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}\right),$$

$$g(\varepsilon_i) = \left(\frac{2m_v}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{-\varepsilon_i - \frac{\Delta}{2}}{2\pi^2}} \Theta\left(-\varepsilon_i - \frac{\Delta}{2}\right). \quad (5)$$

Здесь  $\varepsilon_i, p, m_v, \Psi_i, U_{vp}$  – энергия, импульс, эффективная масса, волновая функция, блоховская амплитуда валентного электрона, соответственно,  $\Delta$  – ширина запрещенной зоны,  $\Theta(x)$  – единичная ступенчатая функция.

Для конечных состояний плотность состояний определяется формулой (2), а для волновой функции будем иметь:

$$\Psi(\mathbf{r}) = U_{co}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_D) F(\mathbf{r} - \mathbf{R}_D), \quad (6)$$

где  $F(\mathbf{r} - \mathbf{R}_D) = (\pi a_D)^{-3/2} \exp(-|\mathbf{r} - \mathbf{R}_D|/a_D)$ ,  $a_D$  – боровский радиус донора,  $\mathbf{R}_D$  – радиус-вектор донора.

Если слабое электромагнитное поле с частотой  $\omega$  считать возмущением, то для вычисления вероятности переходов можно использовать стандартную методику Кубо–Гринвуда (см., напр., [9]).

Тогда, учитывая, что в случае  $T=0$  валентная зона полностью заполнена, а донорная зона заполнена до уровня Ферми, с учетом (2,5,6) для коэффициента поглощения  $K(\omega)$  получается следующее выражение:

$$K(\omega) = 3 \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{7}{6}} 2^{\frac{9}{2}} \frac{\alpha}{n_0 \chi^2} \left(\frac{m_c^2}{m_v m_0}\right)^{\frac{5}{2}} \frac{\Delta}{\hbar \omega} \frac{G(\Omega, \Lambda)}{a_0^2 N_A^6} \Theta(\hbar \omega - I_0). \quad (7)$$

Здесь  $\alpha = e^2 / \hbar c$  – постоянная тонкой структуры,  $n_0$  – показатель преломления кристалла,  $m_0$  – масса свободного электрона,  $a_0$  – боровский радиус,

$$I_0 = \Delta - E_D - \mu \quad (8)$$

– энергетический порог оптического поглощения, а функция

$$G(\Omega, \Lambda) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \int_0^1 \frac{x^2 e^{-2\Omega x} \sqrt{1-x}}{\left(1 + \frac{\Lambda}{\Omega} - x\right)^4} dx, \quad (9)$$

где  $\Lambda = \frac{1}{2\chi} \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{m_c^2}{m_v m_0}\right) \left(\alpha_0 N_A^{\frac{1}{3}}\right)^{-1}$  – безразмерный параметр, характеризующий образец, а  $\Omega = (\hbar\omega - I_0) / \Delta_0$  – относительный избыток энергии фотона.

Из формулы (7) следует, что коэффициент поглощения имеет четкий порог поглощения, определяемый формулой (8), а частотная зависимость  $K(\omega)$  в основном определяется функцией  $G(\Omega, \Lambda)$ .

Путем численного интегрирования можно показать, что функция  $G(\Omega, \Lambda)$  принимает максимальное значение в точке  $\Omega_{\max}$ . Численные значения  $\Omega_{\max}$  приведены в третьем столбце таблицы. Как видно из таблицы, с уменьшением степени компенсации  $\Omega_{\max}$  увеличивается. Однако с уменьшением степени компенсации из-за резкого спада ширины щели соответствующий пик коэффициента поглощения смещается в низкочастотную область (см. пятый столбец таблицы).

Отметим, что соотношение  $\Delta_0 = (\hbar\omega_{\max} - I_0) / \Omega_{\max}$  дает возможность, экспериментально определив  $\omega_{\max}$ , вычислить ширину кулоновской щели.

Рассмотрим следующие частные случаи.

1. Вблизи порога поглощения:  $\Omega \ll 1$ .

В этом случае  $G(\Omega, \Lambda) = \frac{2^4}{7!!} \frac{\Omega^{\frac{7}{2}}}{\Lambda^4} F\left(3, \frac{9}{2}; -\frac{\Omega}{2}\right) \approx \frac{2^4}{7!!} \frac{\Omega^{\frac{7}{2}}}{\Lambda^4}$ , где  $F\left(3, \frac{9}{2}; 2\Omega\right)$  – вырожденная гипергеометрическая функция. Соответственно для  $K(\omega)$  будем иметь:

$$K(\omega) = \frac{2^7 9}{7!! \pi} \frac{\alpha \chi^6}{n_0} \left(\frac{m_v m_c}{m_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{\Delta}{I_0 a_0} \left(\frac{\hbar\omega - I_0}{E_0}\right)^{\frac{7}{2}}, \quad (10)$$

где  $E_0$  – энергия ионизации атома водорода.

Если учитывать, что в нашем случае  $I_0 \approx \Delta$ , то из (10) следует, что коэффициент поглощения зависит только от характеристик матрицы и не зависит от степени легирования и компенсации. Это, очевидно, связано с универсальным характером функции плотности состояний (1).

2. Вдали от порога:  $\Omega \gg 1$ . Вычисление интеграла (9) по методу Лапласа дает результат  $G(\Omega, \Lambda) = \sqrt{\pi/2} (1/e\Omega^{7/2})$  и для  $K(\omega)$  будем иметь

$$K(\omega) = \frac{2^{13} 3 \sqrt{2\pi}}{e} \frac{\alpha}{n_0 \chi^5} \left( \frac{m_0^2}{m_c m_v} \right)^{\frac{5}{2}} \frac{\Delta}{\hbar \omega} a_0 N_A \left( \frac{E_0}{\hbar \omega - I_0} \right)^{\frac{7}{2}} \quad (11)$$

Из формулы (11) следует, что в этой области частот коэффициент поглощения  $K(\omega)$  быстро уменьшается с увеличением частоты и зависит от концентрации акцепторов.

Исходя из качественных соображений, можно утверждать, что при температурах, близких к абсолютному нулю, коэффициент поглощения, в общих чертах повторяя вышеописанное поведение, имеет следующие особенности: во-первых, в результате термических эффектов должен исчезнуть четкий порог, а во-вторых, пик поглощения, уменьшаясь по высоте, перемещается в сторону высоких частот.

## ЛИТЕРАТУРА

1. M.L.Knotek, M.Pollak. Phys. Rev., **B9**, 664 (1974).
2. T.Kurosawa, H.Sugimoto. Prog. Theor. Phys. (Suppl.), **57**, 217 (1975).
3. A.L.Efros, V.I.Shklovskii. J. Phys. C: Sol. St. Phys., **8**, L49 (1975).
4. Б.И.Шкловский, А.Л.Эфрос. Электронные свойства легированных полупроводников. М., Наука, 1979.
5. Б.И.Шкловский, А.Л.Эфрос. ФТП, **14**, 925 (1980).
6. Э.В.Девятов, А.А.Шашкин, В.Т.Долгополов, В.Ханзен, М.Холланд. УФН, **170**, 327 (2000).
7. А.Г.Андреев, А.Г.Забродский, И.П.Взягин, С.В.Егоров. ФТП. **31**, 1174 (1997).
8. А.Г.Забродский. УФН, **168**, 804 (1998).
9. N.F.Mott, E.A.Devis. Electron Processes in Non-Crystalline Materials. Clarendon Press, Oxford, 1979.

ԿՈՒՆԴԱՆՅԱՆ ԳԵՂԵՒԻ ԱԶԴԵՑՈՒԹՅՈՒՆՆ Ա<sup>III</sup>В<sup>V</sup> ՏԻՊԻ  
ԹՈՒՅԼ ԼԵԳԻՐՎԱԾ ԵՎ ԹՈՒՅԼ ՀԱՍԱԿԵՇՈՎԱԾ ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԳՉԻ  
ՀԻՄՆԱՐԱՐ ԿԼԱՆՍԱՆ ԵԶՐԻ ՆՈՒՐԲ ԿԱՌՈՒՑՎԱՅՔԻ ՎՐԱ

Ս.Լ. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ

Առաջարկված է ներմուտարկման բանաձև թույլ լեգիրված և թույլ համակշռված կիսահաղորդչի լիցքակիրների վիճակների խտության համար: Կլանման գործակցի համար ստացված է «արժեքական գոտի - դոնորային գոտի» անցումներով պայմանավորված կլանման գործակցի բացահայտ արտահայտություն: Ուսումնասիրվել է կոլոնյան ճեղքի ազդեցությունը կլանման եզրի նուրբ կառուցվածքի վրա:

INFLUENCE OF A COULOMB GAP ON THE FINE STRUCTURE  
OF THE FUNDAMENTAL ABSORPTION EDGE IN LOW-DOPED  
AND LOW-COMPENSATED A<sup>III</sup>B<sup>V</sup> SEMICONDUCTORS

S.L. HAROUTUNIAN

An interpolation formula for the state densities of charge carriers in low-doped and low-compensated semiconductors is proposed. An explicit expression for the absorption coefficient caused by transitions from the valence band to the donor band is obtained. The influence of the Coulomb gap on the fine structure of the absorption is studied.

УДК 621.382

## СПЕКТРАЛЬНАЯ ПЛОТНОСТЬ РАВНОВЕСНЫХ $1/f$ -ФЛУКТУАЦИЙ ТОКА В ОДНОРОДНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

С.В. МЕЛКОНЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 1 июня 2002 г.)

Исследованы флуктуации тока, обусловленные асимметричными флуктуациями функции распределения электронов, возникающими в равновесных и однородных  $n$ -полупроводниках в результате случайных рассеяний между фононами. Получено выражение для спектра равновесных флуктуаций тока  $S_I(\omega)$ . Показано, что  $S_I \approx \text{const}$  в области  $\omega < \omega_0$ . В области  $\omega_0 < \omega < \omega_1$  частотная зависимость  $S_I(\omega)$  описывается законом  $1/\omega$ , а в области  $\omega > \omega_1$  законом  $1/\omega^2$ . Характерные частоты  $\omega_1$  и  $\omega_0$  определяются как параметрами исследуемого полупроводника, так и процессами рассеяния и диффузии электронов и фононов в импульсном пространстве.

### 1. Введение

До сих пор в теории полупроводников и металлических пленок механизм возникновения  $1/f$ -флуктуаций тока в общем случае является неопределенным. Хорошо известные результаты измерений, проведенных в отсутствие внешнего электрического тока, по мнению авторов работ [1-4], указывают на то, что эти флуктуации имеют равновесную природу. Вместе с тем, равновесные  $1/f$ -флуктуации тока (или сопротивления) все еще мало изучены. Ниже вычислен спектр равновесных флуктуаций тока, возникающих в однородных и невырожденных  $n$ -полупроводниках с простой зонной структурой, находящихся в состоянии теплового равновесия.

### 2. Теория

В работах [5,6] рассмотрен физический механизм возникновения и последующего медленного (диффузионного) затухания равновесных флуктуаций функции распределения (ФР) электронов. Согласно результатам этих работ, в равновесных  $n$ -полупроводниках во взаимодейст-

вующей электрон-фононной системе существуют такие асимметричные флуктуации ФР продольных акустических фононов  $\tilde{g}_q^a$  и электронов  $\tilde{f}_k^a$ , Фурье-составляющие которых можно представить в следующем виде:

$$\tilde{f}_{|k| \leq k_0}^a(\omega) = -\frac{d\tilde{f}_k^0}{d\varepsilon_k} C(\omega)[\hat{\mathbf{u}}\mathbf{k}], \quad \tilde{f}_{|k| > k_0}^a = 0, \quad (1a)$$

$$\tilde{g}_{|q| \leq q_0}^a(\omega) = -\frac{d\tilde{g}_q^0}{d\hbar\omega_q} C(\omega)[\hat{\mathbf{u}}\mathbf{q}]. \quad (1b)$$

Здесь

$$C(\omega) = \frac{C_0 q_m}{\sqrt{2\pi i \omega B}} \operatorname{th} \left( q_m \sqrt{\frac{i\omega}{B}} \right), \quad C_0 \hat{\mathbf{u}} = \frac{9(\hbar v_0)^2}{4\pi k_B T q_0^3 (1 + \xi)} \int_{|q| \leq q_0} d\mathbf{q} \mathbf{q} G_q^a(t=0),$$

$$\xi = \frac{3}{80} \left( \frac{\hbar v_0 q_0}{k_B T} \right)^2 \frac{n}{N_c}, \quad n = N_c e^{F/k_B T}, \quad N_c = 2 \left( \frac{2\pi m_n k_B T}{(2\pi\hbar)^2} \right)^{3/2}, \quad \omega = 2\pi f,$$

$B$  – коэффициент диффузии фононов в импульсном пространстве,  $\varepsilon_k = (\hbar k)^2 / 2m_n$  – энергия электрона в состоянии с волновым вектором  $\mathbf{k}$  зоны проводимости,  $\omega_q = v_0 q$  – частота фонона с волновым вектором  $\mathbf{q}$ ,  $v_0$  – скорость фонона,  $\tilde{f}_k^0$  и  $\tilde{g}_q^0$  – средние значения ФР равновесных электронов и фононов, соответственно,  $F$  – уровень Ферми,  $n$  – концентрация равновесных электронов проводимости,  $N_c$  – эффективная плотность состояний в зоне проводимости,  $f$  – частота. Источник асимметричных флуктуаций ФР фононов  $G_q^a$  и единичный вектор  $\hat{\mathbf{u}}$  характеризуют, соответственно, величину и направление квазиимпульса фононов, возникающих в начальный момент времени  $t=0$  в результате случайных рассеяний фононов на фононах (или на точечных дефектах). Определение характерных величин  $q_m$ ,  $q_0$  и  $k_0$  более подробно дано в [5,6].

Следует отметить, что флуктуации ФР фононов, волновые векторы которых находятся за пределами области  $|q| < q_0$ , в отличие от закона (1b) затухают по более быстрому экспоненциальному закону [5]. Подставляя ур.(1a) в хорошо известное выражение флуктуации плотности электронного тока  $\tilde{\mathbf{j}}(\omega) = -[2e/(2\pi)^3] \int_{BZ} d\mathbf{k} \mathbf{v}_k \tilde{f}_k^a(\omega)$ , после интегрирования по  $\mathbf{k}$  получим

$$\tilde{\mathbf{j}}(\omega) = \frac{3e\hbar}{80(2\pi)^3 m_n} \frac{\xi}{1 + \xi} \frac{q_m}{\sqrt{2\pi i \omega B}} \operatorname{th} \left( q_m \sqrt{\frac{i\omega}{B}} \right) \int_{|q| \leq q_0} d\mathbf{q} \mathbf{q} G_q^a(t=0). \quad (2)$$

В (1) и (2)  $f_k^0$  определяется распределением Больцмана, а  $\tilde{g}_q^0 \approx k_B T / \hbar \omega_q$ . Учтено, что величины  $q_0$  и  $k_0$  обычно намного меньше, чем волновые векторы тепловых фононов и электронов, соответственно.

В общем случае источник флуктуаций  $G_q^a$  является случайной функцией от времени, поскольку помимо начального момента времени  $t=0$  такие флуктуации возникают также и в другие моменты времени. Тогда, как обычно [7], необходимо построить новый случайный процесс  $G_q^a(t)$  как суперпозицию таких единичных событий. Используя упрощенное выражение для спектра источников флуктуации  $G_q^a(t)$  [4], из ур.(2) получим выражение для спектральной плотности флуктуации электронного тока в виде

$$S_I(\omega) = \frac{12\sqrt{2}q_0^7 q_m^2}{25(4\pi)^5 (l+3)(1+\xi)^2} \frac{(ev_0 n S)^2}{VN_c^{10/3}} \frac{\left| \operatorname{th} \left( q_m \sqrt{\frac{i\omega}{B}} \right) \right|^2}{B\omega\tau_{ph,ph}(q_0)}. \quad (3)$$

Здесь  $\tau_{ph,ph}(q) \sim q^{-l}$  – время релаксации фонон-фононных рассеяний, показатель  $l$  характеризует механизм этих рассеяний,  $V$  – объем, а  $S$  – площадь поперечного сечения образца.

В невырожденных полупроводниках обычно  $\xi \ll 1$ . Кроме того, в области  $\omega > \omega_0$  (где  $\omega_0 = B/q_m^2$ ) гиперболическую функцию в ур.(3) можно заменить единицей. Тогда  $S_I$  можно представить в упрощенном и более наглядном виде:

$$S_I(f) = \frac{12\sqrt{2}}{25(4\pi)^6 (l+3)} \frac{(ev_0 n S)^2}{VN_c^{10/3}} \frac{q_0^7 q_m^2}{B\tau_{ph,ph}(q_0) f}. \quad (4)$$

Как видно из ур.(3) и (4), спектр равновесных флуктуаций тока имеет ряд интересных особенностей. Ниже вкратце рассмотрены некоторые из них.

### 3. Обсуждение

Анализ уравнения (3) показывает, что с уменьшением частоты спектр шума увеличивается и стремится к конечному значению  $S_I(\omega) \approx S_I(\omega=0) = \text{const}$  при  $\omega < \omega_0$ . Характерная частота  $\omega_0$  помимо зависимости от коэффициента диффузии фононов  $B$  через  $q_m$  зависит также от таких параметров полупроводника, как времена релаксации электрон-фононных ( $\tau_{e,ph}$ ) и фонон-электронных ( $\tau_{ph,e}$ ) рассеяний, концентрация электронов проводимости. Важно отметить, что ур.(3) применимо в достаточно широкой, но ограниченной области частот  $0 \leq \omega \leq \omega_1$ . Величина верхнего частотного предела  $\omega_1$  определяется временем установления динамического равновесия между длинноволновыми фононами и электронами, т.е.  $\omega_1 \approx \min(1/\tau_{ph,e}, 1/\tau_{e,ph})$  (более подробно см. в [5,6]). Предварительные оценки показывают, что, например, для  $n$ -Si при комнатных температурах  $\omega_0 \sim 10^{-11} - 10^{-10} \text{ с}^{-1}$ , а  $\omega_1 \sim 10^5 - 10^6 \text{ с}^{-1}$ .

Процесс установления динамического равновесия протекает по экспоненциальному закону [5], а как известно [7], спектр экспоненци-

ально релаксирующих флуктуаций изменяется с частотой по закону  $\omega^{-2}$ . Следовательно,  $S_I(\omega) \sim 1/\omega^2$  при  $\omega > \omega_1$ . Другой, очень важной особенностью частотной зависимости спектра равновесных флуктуаций тока является то, что в области  $\omega_0 \leq \omega \leq \omega_1$  она определяется ур.(4) и имеет форму  $1/\omega$ .

Данная работа выполнена в рамках гранта МНТЦ А-322.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Г.Н.Бочков, Ю.Е.Кузовлев. УФН, **141**, 151 (1983).
2. R.F.Voss, J.Clark. Phys. Rev., **13B**, 362 (1976); Phys. Rev. Lett., **36**, 142 (1976).
3. F.N.Hooge. IEEE Trans., **ED41**, 1926 (1994).
4. И.М.Дыкман, П.М.Томчук. Явления переноса и флуктуации в полупроводниках. Киев, Наукова Думка, 1981.
5. S.V.Melkonyan, V.M.Aroutiounian, F.V. Gasparyan, C.E. Korman. Journal of Fluctuation and Noise Letters, 2002 (submitted).
6. S.V.Melkonyan, V.M.Aroutiounian, F.V. Gasparyan, C.E. Korman. Journal of Fluctuation and Noise Letters, 2002 (submitted).
7. А.Ван дер Зил. Флуктуационные явления в полупроводниках. М., ИЛ, 1961.

## ՀՈՍԱՆՔԻ ՀԱՎԱՍԱՐԱԿՇԻՌ 1/f ՖԼՈՒԿՏՈՒՑԻԱՅԻԱՆԵՐԻ ՍՊԵԿՏՐԱԼ ԽՏՈՒԹՅՈՒՆԸ ՀԱՍԱՍԵՆ ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴԻՉՆԵՐՈՒՄ

Ս.Վ. ՄԵԼԿՈՆՅԱՆ

Ուսումնասիրված են էլեկտրոնների բաշխման ֆունկցիայի սիմետրիկ ֆլուկտուացիաներով պայմանավորված հոսանքի ֆլուկտուացիաները, որոնք առաջանում են հավասարակշիռ և համասեռ n-տեսակի կիսահաղորդիչներում՝ ֆոնոնների միջև տեղի ունեցող պատահական ցրումների հետևանքով: Ստացված է արտահայտություն հոսանքի հավասարակշիռ ֆլուկտուացիաների  $S_I(\omega)$  սպեկտրի համար: Ցույց է տրված, որ  $\omega < \omega_0$  տիրույթում  $S_I \approx \text{const}$ :  $S_I(\omega)$  հաճախային կախվածությունը  $\omega_0 < \omega < \omega_1$  տիրույթում նկարագրվում է  $1/\omega$  օրենքով, իսկ  $\omega > \omega_1$  տիրույթում՝  $1/\omega^2$  օրենքով:  $\omega_1$  և  $\omega_0$  բնութագրական հաճախությունները որոշվում են ինչպես հետազոտվող կիսահաղորդիչ պարամետրերով, այնպես էլ ինպուլսային տարածության մեջ ընթացող էլեկտրոնների և ֆոնոնների ցրման և դիֆուզիայի պրոցեսներով:

## SPECTRAL DENSITY OF CURRENT EQUILIBRIUM 1/f FLUCTUATIONS IN HOMOGENEOUS SEMICONDUCTORS

S.V. MELKONYAN

Current fluctuations conditioned by asymmetric fluctuations of the electron distribution function are studied. The fluctuations originate in equilibrium and homogeneous n-type semiconductors as a result of the random scattering between phonons. An expression for the current equilibrium fluctuation spectra  $S_I(\omega)$  is obtained. It is shown that  $S_I \approx \text{const}$  in the range  $\omega < \omega_0$ . In the range  $\omega_0 < \omega < \omega_1$  the frequency dependence of  $S_I(\omega)$  is described by the  $1/\omega$  law, and in the range  $\omega > \omega_1$  by the  $1/\omega^2$  law. The characteristic frequencies  $\omega_1$  and  $\omega_0$  are determined by the semiconductor parameters as well as by the electron and phonon diffusion and scattering processes in the momentum space.

УДК 532.78.3

## РАСЧЕТ ЭНЕРГИИ РЕШЕТОК $\alpha$ - И $\beta$ -МОДИФИКАЦИЙ ОКТОГЕНА

Р.М. АБРАМЯН, Д.А. БАДАЛЯН

Государственный инженерный университет Армении

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 16 декабря 2001 г.)

На ЭВМ по ранее составленной программе вычислены энергии решеток  $\alpha$ - и  $\beta$ -модификаций октогена. Расчет проведен методом атом – атомных потенциалов. Для определения атомных координат использованы известные кристаллографические данные. Полученные результаты сопоставлены с экспериментом.

Теоретическое исследование потенциальной энергии взаимодействия частиц кристалла необходимо для понимания его стабильной структуры, фазовых переходов в веществе и основных термодинамических свойств кристалла.

Большинство органических веществ способны давать кристаллы разной структуры, причем, кристаллизуя вещество из разных растворителей, можно получить различные кристаллы, которые в нормальных условиях могут сосуществовать, хотя только один из них может иметь стабильную структуру в данных условиях, т.е. минимум свободной энергии. Для органических кристаллов переход в стабильное состояние связан с преодолением высоких барьеров. Самодиффузия в бездефектном молекулярном кристалле, построенном из крупных молекул, почти невозможна [1,2]. В этом отношении большой интерес представляет октоген, как вторичное взрывчатое вещество, которое существует в 4-х полиморфных формах [3,4]. Октоген, или 1,3,5,7-тетранитро-1,3,5,7-тетраазоциклооктан, называемый также циклотетраметилтен-тетранитроамин и имеющий химическую формулу  $C_4H_8N_8O_8$ , является высокоплотным полинитросоединением с большой скоростью детонации. Октоген имеет большое прикладное значение, как компонент в ракетных топливах, а также как мощное взрывчатое вещество [5,6]. Это соединение представляет собой типичную физическую однокомпонентную систему, образованную 4-мя обратимо превращающимися кристаллическими модификациями, которые называются  $\beta, \alpha, \gamma, \delta$  (рассматривая модификации

от низких температур последовательно к более высоким). При атмосферном давлении проявляются только превращения  $\alpha \rightarrow \delta$ ,  $\beta \rightarrow \delta$  и  $\gamma \rightarrow \delta$  обычно при 175<sup>0</sup>С и выше.  $\alpha$ -фаза может неопределенно долго существовать при комнатной температуре и атмосферном давлении [5].

Тот факт, что молекулы в органическом кристалле образуют плотные упаковки, показывает аддитивность энергии взаимодействия не только в отношении взаимодействия молекулы с молекулой, но и в отношении взаимодействия атома с атомом. Как показано в [2,7], электростатические энергии взаимодействия пренебрежимо малы по сравнению с теплотой сублимации для углеводородов и сравнительно невелики в случае молекул с достаточно большими дипольными моментами.

Современная квантовая химия в принципе позволяет теоретический расчет межмолекулярных сил. Для таких расчетов строились разные феноменологические теории. Одним из возможных подходов может служить модель атом-атомных потенциалов [1]. В этой модели Ван-дер-Ваальсовское взаимодействие двух молекул в кристалле аппроксимируется суммой парных взаимодействий атомов одной молекулы с атомами другой. Изучены возможности применения этой модели для вычисления физических характеристик молекулярного кристалла [7-9]. В этой модели инкрементом взаимодействия является кривая атом-атом потенциала, и предполагается, что нет никакого различия между кривыми взаимодействия валентно не связанных "нейтральных" атомов, принадлежащих одной и той же или разным молекулам. Если потенциал взаимодействия валентно не связанных атомов записан в форме

$$U = -A \cdot r^{-6} + B \cdot \exp\left(-\frac{r}{\rho}\right), \quad (1)$$

где  $r$  – расстояние между атомами, а  $A$ ,  $B$  и  $\rho$  – постоянные, то энергия решетки кристалла выразится в виде суммы таких потенциалов по всем парам взаимодействующих атомов:

$$E = \frac{1}{2} \sum [-A \cdot r^{-6} + B \cdot \exp(-r/\rho)].$$

При вычислении энергии решеток органических молекулярных кристаллов используется [1] универсальная потенциальная функция для взаимодействий СС, СН и НН в некоторой приведенной координате  $z$ , где  $z = r/r_0$  есть отношение расстояния между атомами к их равновесному расстоянию. Тогда (1) примет вид

$$U = U_2 \cdot \frac{z^{-6} - \frac{6}{\alpha} \cdot e^{\alpha} \cdot e^{-\alpha z}}{11,4 - \frac{6}{\alpha} \cdot e^{\alpha/3}},$$

где  $U_{2/3}$  – энергия взаимодействия атомов, находящихся на расстоянии  $r = 2/3 \cdot r_0$ , а  $\alpha = r_0 / \rho$ . В качестве равновесных расстояний приняты: C – C 3,8 Å; C – H 3,3 Å; H – H 2,8 Å. Приняв  $U_{2/3}$  и  $\alpha$  равными соответственно 3,5 ккал/моль и 13,6 Å, получим

$$U = -0,119 \cdot z^{-6} + 4,2 \cdot 10^4 \cdot e^{-13,6z} \quad (2)$$

Энергия решетки молекулярного кристалла, в котором нет водородных связей, в общем случае складывается из энергии Ван-дер-Ваальсовского взаимодействия нейтральных молекул и энергии мультипольных взаимодействий:

$$U_{\text{реш}} = U_{\text{нейтр}} + U_{\text{мульти}}$$

В работах [8,10] показано, что дипольные и квадрупольные взаимодействия не дают существенного вклада в энергию решетки ромбических структур. Для молекулы с дипольным моментом порядка 4 Дебай наибольшее изменение энергии будет порядка – 2 ккал/моль, что для больших молекул составляет малую часть общей энергии решетки.

Расчет энергии решетки октогена  $\beta$ - и  $\alpha$ -модификаций проводился нами с помощью кривой (2) для взаимодействия атомов углерода и водорода, а взаимодействия с участием атомов кислорода и азота рассчитывались по кривым, полученным в работах [2,10].

Для расчета использовались кристаллографические параметры решетки и координаты атомов для  $\beta$ - и  $\alpha$ -модификаций октогена, определенные рентгеноструктурными и нейтронографическими исследованиями при комнатной температуре [3,4]. Расчет был проведен на ЭВМ с точностью порядка 0,1 ккал/моль. Энергия решетки  $\beta$ -модификации составила –22,8 ккал/моль, а  $\alpha$ -модификации –11,0 ккал/моль. Этот результат также говорит в пользу того, что  $\alpha$ -фаза, в отличие от  $\beta$ -фазы, при комнатной температуре находится в кинетически заторможенном метастабильном состоянии. Экспериментально определена теплота сублимации для  $\beta$ -фазы октогена, которая равна –40 ккал/моль [5]. Такое расхождение с расчетом могло получиться из-за того, что в расчете не учтены водородные связи, которые присутствуют в  $\beta$ - и  $\alpha$ -фазах октогена.

## ЛИТЕРАТУРА

1. А.И.Китайгородский. УФН, **127**, 391 (1979).
2. А.И.Китайгородский. Молекулярные кристаллы. М., Наука, 1971.
3. H.H.Cady, A.C.Larson, D.T.Cramer. Acta Cryst., **16**, 617 (1965).
4. S.Choi Chang. Acta Cryst., **В 26**, 1235 (1970).
5. Р.М.Абрамян. Канд. диссертация. Влияние внешних факторов равновесия, давления и температуры, а также излучения на фазовые состояния некоторых полинитросоединений. М., 1971.
6. Р.М.Абрамян. Изв. НАН Армении и ГИУА, сер. техн. наук, **44**, 167 (2001).
7. У.Буркерт, Н.Эллинджер. Молекулярная механика. М., Мир, 1986.
8. А.И.Китайгородский, К.В.Мирская. Кристаллография, **10**, 162 (1965).

9. Д.А.Бадалян, Р.М.Абрамян. Изв. НАН Армении, Физика, 32, 167; 229 (1997).  
10. А.И.Китайгородский, К.В.Мирская, В.В.Научитель. Кристаллография, 14, 900 (1969).

ՕԿՏՈԳԵՆԻ  $\alpha$ - ԵՎ  $\beta$ -ՄՈԴԻՖԻԿԱՑԻԱՆԵՐԻ ՑԱՆՑԵՐԻ  
ԷՆԵՐԳԻԱՆԵՐԻ ՀԱՇՎԱՐԿԸ

Ռ.Մ. ԱԲՐԱՀԱՄՅԱՆ, Դ.Հ. ԲԱԴԱԼՅԱՆ

Նախապես կազմած ծրագրով ԷՀՄ-ի օգնությամբ հաշվված է օկտոգենի  $\alpha$ - և  $\beta$ -մոդիֆիկացիաների բյուրեղային ցանցերի էներգիան: Հաշվարկներում կիրառված է ատոմ-ատոմային պոտենցիալների մեթոդը: Ատոմների կոորդինատները որոշելու համար օգտագործվել են հայտնի բյուրեղագիտական տվյալները: Ստացված արդյունքները համեմատված են փորձարարական տվյալների հետ:

LATTICE ENERGY CALCULATIONS FOR  $\alpha$ - AND  $\beta$ -MODIFICATIONS  
OF OCTOGEN

R.M. ABRAHAMIAN, D.H. BADALYAN.

Lattice energies of  $\alpha$ - and  $\beta$ -modifications of octogen are computed with use of the earlier compiled program. The calculation is carried out by the method of atom-atom potentials. The known crystallographic data are used to determine the atomic coordinates. The obtained results are compared with experimental data.

УДК 532.783

## ПОВЕДЕНИЕ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ НЕКОТОРЫХ СИЛЬНО- И СЛАБОПОЛЯРНЫХ НЕМАТИЧЕСКИХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ И ИХ СМЕСЕЙ ВБЛИЗИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ

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

Институт прикладных проблем физики НАН Армении

(Поступила в редакцию 8 октября 2001 г.)

Исследовано влияние молекулярной структуры и фазовых переходов на диэлектрическую проницаемость сильно- и слабополярных нематических жидких кристаллов (НЖК) и их бинарных смесей. Показано, что скачки поперечной составляющей диэлектрической проницаемости нематиков при фазовом переходе НЖК – изотропная жидкость обусловлены возрастающей параллельной ориентацией поперечных диполей соседних молекул. Установлено образование смектической и возвратной нематической мезофаз в бинарных смесях сильно- и слабополярных НЖК. Выявлена также зависимость термостабильности мезофаз бинарных смесей от концентрации и молекулярной структуры компонентов.

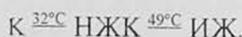
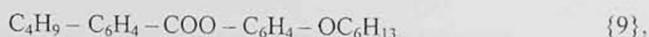
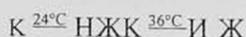
Поскольку при реализации любого электрооптического эффекта слой жидкого кристалла (ЖК) подвергается воздействию электрического поля, диэлектрическая проницаемость ( $\epsilon$ ) является чрезвычайно важным параметром. В веществе с полярными молекулами в суммарную поляризацию, состоящую из электронной и ионной частей, дает вклад и ориентационная поляризация, связанная с тенденцией постоянных дипольных моментов ориентироваться параллельно электрическому полю. В случае жидких кристаллов возникает сложная ситуация, когда анизотропная проницаемость сочетается с жидкостным поведением вещества [1]. Жидкокристаллические вещества с большой положительной диэлектрической анизотропией ( $\Delta\epsilon > 0$ ;  $\Delta\epsilon = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$ ) чрезвычайно важны с точки зрения практического использования. Обычно это цианопроизводные различных химических классов, в которых сильнополярная CN группа находится в пара-положении с фенильным кольцом так, что направление дипольного момента совпадает с длинной осью молекул. Отметим, что с точки зрения практического применения особую ценность представляют исследования смесей жидких кристаллов, так как именно смеси в основном используются в качестве жидкокристаллических мате-

риалов для самых разнообразных устройств [1].

В настоящей работе исследовано влияние молекулярной структуры и фазовых переходов на диэлектрическую проницаемость сильно- и слабополярных НЖК и их бинарных смесей с различными концентрациями (20, 25, 30, 50%) сильнополярных компонентов. В качестве сильнополярных НЖК выбраны 4-цианофенил-4'-гептилбензоат -{2} и 4-пентил-4'-цианобифенил -{8}, а в качестве слабополярного НЖК выбран гексилорифенил-4'-бутилбензоат -{9}. Ниже приведены химические формулы и температуры фазовых переходов исследованных НЖК:



Кристалл(K)<sup>43°C</sup> НЖК<sup>58°C</sup> изотропная жидкость (ИЖ)



Диэлектрические измерения проводились с помощью устройства типа ТР-9701, действующего по принципу мостов Шеринга. Для проведения экспериментов были изготовлены ячейки типа "сэндвич". Планарную ориентацию получали предварительной обработкой поверхностей ячеек. Диэлектрическим измерениям подвергались образцы с толщиной 10 мкм. Измерения проводились на низких частотах, где ориентационная поляризация меняется в такт с внешним полем. На рис.1 приведены результаты измерения поперечной составляющей диэлектрической про-

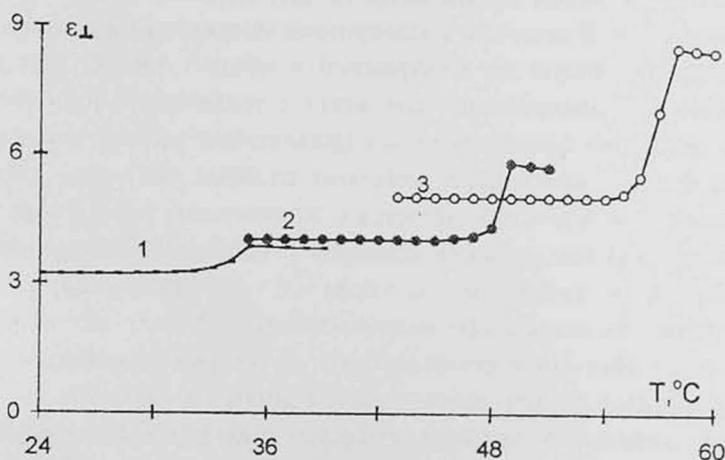


Рис.1. Температурные зависимости  $\epsilon_{\perp}$  в нематических соединениях: 1 - {8}, 2 - {9}, 3 - {2}.

нищаемости ( $\epsilon_{\perp}$ ) в веществах {2}, {8}, {9}. Как видно из рисунка, все вещества обладают только одной мезофазой: нематической. Видно также, что при фазовом переходе НЖК – ИЖ  $\epsilon_{\perp}$  у всех веществ скачкообразно увеличивается и доходит до насыщения.

Остановимся вначале на оценке поперечного дипольного момента молекул НЖК по результатам полученных экспериментальных данных. Из теории диэлектриков известно, что можно без каких-либо сведений о структуре диэлектрика сделать определенные заключения о поведении диполей в диэлектрике, исходя из экспериментальных кривых температурных зависимостей статической диэлектрической проницаемости. Таким образом, применив для полученных данных (см. рис.1) формулу Кирквуда для случая жидкостей, состоящих из жестких диполей [2], можно вычислить величину

$$B(T) = (\epsilon_{\perp} - n_{\perp}^2)(2\epsilon_{\perp} + n_{\perp}^2)/3\epsilon_{\perp}, \quad (1)$$

характеризующую поперечный средний дипольный момент выделенной макроскопической сферической области образцов ( $T$  – температура,  $n_{\perp}$  – оптический показатель преломления необыкновенного луча в среде ЖК [1]). Отметим, что для вычисления величины  $B$  по выражению (1) необходимо, чтобы был известен  $n_{\perp}$  в соответствующей области. Измерения, проведенные с помощью гониометра ГУ5, показали, что в нематической фазе исследованных веществ  $n_{\perp} \approx 1,4$ . Результаты расчетов величины  $B$  приведены в графической форме на рис.2. Из рисунка видно, что в нематической фазе исследованных веществ наибольшее значение  $B$  получено для соединения {2}. Наименьшее значение  $B$  относится к соединению {8}, а промежуточное значение соответствует веществу {9}. Такое различие величины  $B$  в веществах, видимо, связано с тем обстоятельством, что в соединении {2} наличие мостиковой СОО группы приводит к увеличению  $B$  (по сравнению с цианобифенильными молекулами вещества {8}), поскольку дипольный момент группы СОО вносит вклад как в параллельную, так и в перпендикулярную составляющую ориентационной поляризации. А в веществе {8}, из-за сокращения цепи сопряжения в остове молекул, средний поперечный дипольный момент сферической области уменьшается. По сравнению с веществом {8}, увеличение  $B$  у соединения {9} обусловлено тем, что (хотя оно и считается слабополярным НЖК вдоль длинной оси молекул) наличие СОО группы между фенильными кольцами, а также наличие алкилокси группы в конце молекул приводят к относительному увеличению поперечного дипольного момента молекул, а значит, и к сравнительному увеличению  $B$ .

Как уже было упомянуто выше,  $B(T)$  характеризует не только величину дипольных моментов молекул, но и их поведение в зависимости от температуры [2]. Как видно из рис.2, в исследованном температурном

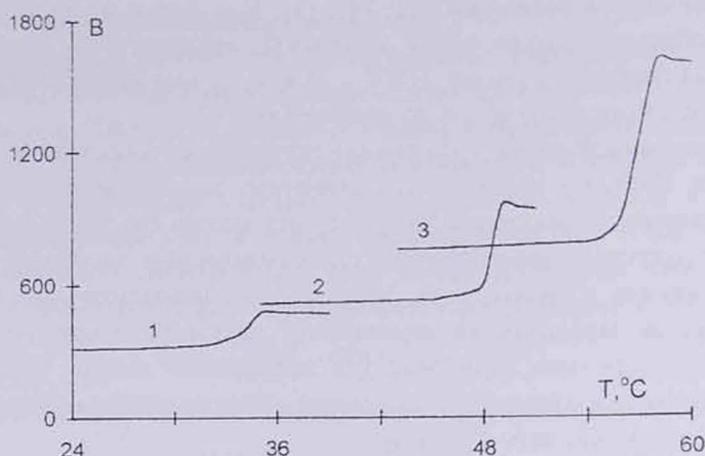


Рис.2. Температурные зависимости величины  $B$  в нематических соединениях: 1 – {8}, 2 – {9}, 3 – {2}.

интервале с повышением температуры величина  $B$ , медленно изменяясь, скачкообразно увеличивается вблизи фазового перехода НЖК–ИЖ, доходя до насыщения в точке перехода. Такое увеличение  $B$  вблизи фазового перехода НЖК–ИЖ указывает на возрастающую тенденцию поперечных дипольных моментов молекул НЖК к параллельной ориентации. Отметим, что сравнительно малое приращение величины  $B$  у вещества {8} вблизи указанного перехода, по-видимому, обусловлено относительно малой поперечной составляющей дипольного момента молекул соединения {8}, вызванной структурными особенностями молекул (как уже отмечалось выше). Следует отметить также, что известные из литературы данные о скачках продольной и поперечной составляющих диэлектрической проницаемости при фазовом переходе НЖК–ИЖ не объясняются основными выводами теории Майера–Мейера для статических диэлектрических постоянных НЖК [3]. Для уяснения этого обстоятельства представим выражения для  $\epsilon_{\parallel}$  и  $\epsilon_{\perp}$  из теории Майера–Мейера [3]:

$$\epsilon_{\parallel} - 1 = (4\pi\rho/M) / N_A hF \{ \langle \gamma^E \rangle + (2/3)\Delta\gamma^E S + F(\mu^2/3KT)[1 - (1 - 3\cos^2 \beta)S] \}, \quad (2)$$

$$\epsilon_{\perp} - 1 = (4\pi\rho/M) / N_A hF \{ \langle \gamma^E \rangle - (2/3)\Delta\gamma^E S + F(\mu^2/3KT)[1 + (1/2)(1 - 3\cos^2 \beta)S] \}, \quad (3)$$

где  $\rho$  – плотность,  $M$  – молекулярная масса,  $N_A$  – число Авогадро,  $h$  – коэффициент, связывающий внешнее поле с полем в полости (теория Онзагера),  $F$  – поле реакции (поле Онзагера),  $\langle \gamma^E \rangle$  – средняя поляризуемость молекул,  $\Delta\gamma^E = \gamma_{\parallel}^E - \gamma_{\perp}^E$  – анизотропия поляризуемости молекул,  $\mu$  – дипольный момент,  $K$  – константа Больцмана,  $S$  – степень упорядоченности,  $\beta$  – угол между дипольным моментом и направлением максимальной поляризуемости молекул. Проведя простой расчет средней ди-

электрической проницаемости ( $\langle \epsilon \rangle = (\epsilon_{\parallel} + 2\epsilon_{\perp})/3$ ) нематической фазы, используя выражения (2) и (3), легко убедиться, что  $\langle \epsilon \rangle$  не содержит параметра порядка  $S$  и совпадает с диэлектрической проницаемостью ( $\epsilon_{is}$ ) изотропной фазы [3]:

$$\epsilon_{is} - 1 = (4\pi\rho/M)/N_A hF\{\langle \gamma^E \rangle + F(\mu^2/3KT)\}. \quad (4)$$

С другой стороны, известно, что для нематиков с большой положительной диэлектрической анизотропией разница экспериментальных значений  $\langle \epsilon \rangle$  и  $\epsilon_{is}$  составляет 4-5% ( $\langle \epsilon \rangle < \epsilon_{is}$ ) [1]. Для объяснения экспериментальных скачков  $\epsilon_{\parallel}$  и  $\epsilon_{\perp}$  в нематиках при фазовом переходе НЖК-ИЖ, Чандрасекар в модели Ознагера [2] допускает предположение об антисегнетоэлектрическом ближнем порядке расположения диполей молекул, при отсутствии дальнего порядка [3]. Тем самым Чандрасекар, отказываясь от предположения в теории Майера-Мейера о невзаимодействии молекул друг с другом, предполагает, что при указанном расположении диполей продольные дипольные моменты имеют тенденцию к антипараллельному расположению, а поперечные – к параллельному. В результате, в выражениях (2) и (3) появляется дополнительный член [3]

$$F(\mu^2/KT) \langle \cos \theta_l \cos \theta_m \rangle \quad (5)$$

(где  $\theta_l, \theta_m$  – углы между дипольным моментом и направлением максимальной поляризуемости для  $l$ -ой и  $m$ -ой молекул соответственно): отрицательный в случае антипараллельной упаковки диполей (добавляется к выражению (2)), и положительный в случае параллельной упаковки (добавляется к выражению (3)). Таким образом, можно заключить, что вышеописанное поведение величины  $B$  в исследованных веществах вблизи фазового перехода НЖК-ИЖ (см. рис.2) подтверждает поправку Чандрасекара, сделанную в теории Майера-Мейера для статических диэлектрических постоянных НЖК [3].

Как уже отмечалось выше, особую ценность представляют исследования смесей сильно- и слабополярных НЖК. На рис.3 и 4 приведены температурные зависимости  $\epsilon_{\perp}$  в смесях {9}/{8} (20, 25, 30, 50%) и {9}/{2} (20, 25, 30, 50%), соответственно. Начнем обсуждение с поведения  $\epsilon_{\perp}$  в зависимости от температуры в бинарных системах {9}/{8}. Отметим, что, как правило, при выборе сильно- и слабополярных НЖК для создания смесей избегают использования компонентов, сильно отличающихся по полярности и очень близких по молекулярной структуре. В первом случае межмолекулярное взаимодействие увеличивается, что приводит к появлению индуцированных мезофаз или образованию нескольких эвтектик, во втором – происходит образование широких областей твердых растворов, сопровождающееся заметным повышением температуры плавления эвтектик [4]. В этом плане вещества {9}/{8} являются довольно “удобными” компонентами для образования смесей. Как видно

из рис.3, указанные смеси обладают единственной мезофазой: нематической. Ниже приведены температуры фазовых переходов в системах  $\{9\}/\{8\}$ , полученные нами методом поляризационной микроскопии и с помощью диэлектрических измерений:

$$\text{K}^{34^\circ\text{C}}\text{H}\text{ЖК}^{46^\circ\text{C}}\text{ИЖ} - \{9\}/\{8\}(20\%),$$

$$\text{K}^{34^\circ\text{C}}\text{H}\text{ЖК}^{48^\circ\text{C}}\text{ИЖ} - \{9\}/\{8\}(25\%),$$

$$\text{K}^{34^\circ\text{C}}\text{H}\text{ЖК}^{50^\circ\text{C}}\text{ИЖ} - \{9\}/\{8\}(30\%),$$

$$\text{K}^{34^\circ\text{C}}\text{H}\text{ЖК}^{52^\circ\text{C}}\text{ИЖ} - \{9\}/\{8\}(50\%).$$

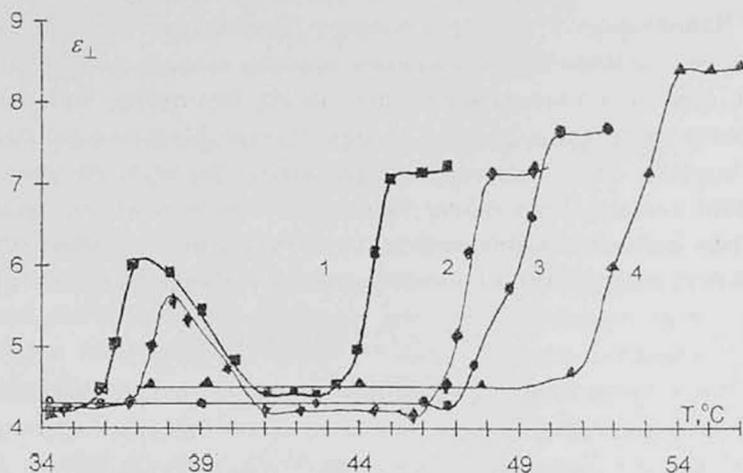


Рис.3. Температурные зависимости  $\epsilon_{\perp}$  в бинарных смесях: 1 -  $\{9\}/\{8\}(20\%)$ , 2 -  $\{9\}/\{8\}(25\%)$ , 3 -  $\{9\}/\{8\}(30\%)$ , 4 -  $\{9\}/\{8\}(50\%)$ .

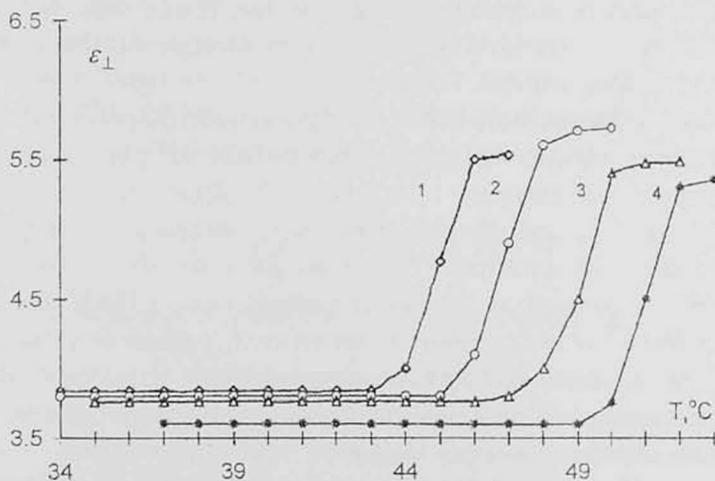


Рис.4. Температурные зависимости  $\epsilon_{\perp}$  в бинарных смесях: 1 -  $\{9\}/\{2\}(20\%)$ , 2 -  $\{9\}/\{2\}(25\%)$ , 3 -  $\{9\}/\{2\}(30\%)$ , 4 -  $\{9\}/\{2\}(50\%)$ .

Заметим, что точка плавления указанных смесей от концентрации компонентов не зависит. Однако, в отличие от точки плавления, точка просветления смесей меняется с изменением концентрации компонентов. Как видно из рис.3, с увеличением концентрации сильнополярного компонента точка просветления смесей продвигается вперед – повышается термостабильность смесей. Обратим внимание еще на одно обстоятельство, касающееся точки просветления смесей. Известно, что для физико-химических параметров ЖК смесей существует так называемый закон аддитивности, характеризующий изменения указанных параметров компонентов в смесях [4]. В частности, для точки просветления смесей упомянутый закон выражается следующим образом [4]:

$$T_{см} = X_1 T_1 + X_2 T_2; \quad X_2 = 1 - X_1, \quad (6)$$

где  $T_{см}$  – точка просветления смеси,  $T_1, T_2$  – точки просветления компонентов,  $X_1, X_2$  – доли компонентов в смеси. Проведя простой расчет, используя результаты измерения  $\varepsilon_{\perp}$  для смесей {9}/{8} (рис.3) и их компонентов (рис.1), легко убедиться, что в отличие от точки просветления, значения  $\varepsilon_{\perp}$  в нематической фазе смесей {9}/{8} подчиняются закону аддитивности. Этот закон для диэлектрической проницаемости выражается следующим образом [4]:

$$\varepsilon_{см} = X_1 \varepsilon_1 + X_2 \varepsilon_2; \quad X_2 = 1 - X_1, \quad (7)$$

где  $\varepsilon_{см}, \varepsilon_1, \varepsilon_2$  – значения диэлектрической проницаемости смеси и ее компонентов, соответственно, при фиксированной температуре в нематической фазе.

Рассмотрим теперь поведение  $\varepsilon_{\perp}$  в зависимости от температуры в бинарных смесях {9}/{2}. Как известно, одним из “благоприятных” условий индуцирования смектической фазы в смесях сильно- и слабополярных НЖК является сходство молекулярной структуры компонентов [4]. В связи с этим, исследование поведения  $\varepsilon_{\perp}$  в зависимости от температуры в указанных смесях, молекулярные структуры компонентов которых весьма схожи, представляет особый интерес. Как будет показано ниже, при определенных концентрациях компонентов в смесях {9}/{2} индуцируются мезофазы. Из рис.4 видно, что поведение  $\varepsilon_{\perp}$  в зависимости от температуры в смесях {9}/{2}(30%), {9}/{2}(50%) аналогично поведению  $\varepsilon_{\perp}$  в смесях {9}/{8} (см. рис.3). Это свидетельствует о существовании единственной мезофазы (нематической) в указанных смесях. Однако по-другому ведет себя  $\varepsilon_{\perp}$  в зависимости от температуры в бинарных смесях {9}/{2}(20%), {9}/{2}(25%). Как видно из рис.4, в нематической фазе смесей, начиная с определенной температуры и с ее понижением,  $\varepsilon_{\perp}$  увеличивается, что свойственно поведению  $\varepsilon_{\perp}$  в смектик А (СмА) фазе. Такое увеличение  $\varepsilon_{\perp}$  происходит вследствие корреляции в

расположении соседних диполей – продольные компоненты диполей “предпочитают” антипараллельную взаимную ориентацию, а поперечные – параллельную [3]. Из рис.4 видно также, что в индуцированной СМА фазе двух смесей, начиная с определенного значения температуры и с ее понижением,  $\epsilon_{\perp}$  плавно уменьшается, что связано с образованием возвратного нематика, свойственным для смесей сильно- и слабополярных НЖК [4]. Отсутствие вышеописанного поведения  $\epsilon_{\perp}$  в исследованном температурном интервале смесей  $\{9\}/\{2\}$  (30,50%) указывает на исчезновение индуцированных мезофаз при увеличении концентрации сильнополярного компонента  $\{2\}$ . Таким образом, можно констатировать индуцирование мезофаз в бинарных системах  $\{9\}/\{2\}$  при определенных концентрациях компонента  $\{2\}$  (20,25%) [5]. Отметим, что причины как образования, так и исчезновения мезофаз в смесях в зависимости от концентрации и молекулярной структуры компонентов обсуждены в работе [5]. Ниже приведены температуры фазовых переходов в смесях  $\{9\}/\{2\}$ , полученные нами методом поляризационной микроскопии и с помощью диэлектрических измерений:

- $K^{34^{\circ}C}$  Возвратный нематик (ВН)  $^{37^{\circ}C}$  СМА  $^{41^{\circ}C}$  НЖК  $^{45^{\circ}C}$  ИЖ –  $\{9\}/\{2\}$  (20%),  
 $K^{34^{\circ}C}$  ВН  $^{38^{\circ}C}$  СМА  $^{41^{\circ}C}$  НЖК  $^{48^{\circ}C}$  ИЖ –  $\{9\}/\{2\}$  (25%),  
 $K^{34^{\circ}C}$  НЖК  $^{50^{\circ}C}$  ИЖ –  $\{9\}/\{2\}$  (30%),  
 $K^{34^{\circ}C}$  НЖК  $^{54^{\circ}C}$  ИЖ –  $\{9\}/\{2\}$  (50%).

Заканчивая обсуждение поведения  $\epsilon_{\perp}$  в зависимости от температуры в смесях  $\{9\}/\{2\}$ , отметим, что, как и в случае смесей  $\{9\}/\{8\}$ , точка плавления не зависит от концентрации компонентов. Что касается точки просветления смесей, то она продвигается вперед с увеличением концентрации сильнополярного компонента (в чем легко убедиться по поведению  $\epsilon_{\perp}$  (см. рис.4)). То есть, как и в случае смесей  $\{9\}/\{8\}$ , термостабильность нематической фазы смесей  $\{9\}/\{2\}$  повышается с увеличением концентрации сильнополярного компонента. Отметим, что причина указанного свойства термостабильности нематической фазы исследованных смесей обсуждается в работе [5]. Следует отметить также, что, как и в случае смесей  $\{9\}/\{8\}$ , точка просветления смесей  $\{9\}/\{2\}$  закону аддитивности (см.(6)) не подчиняется. Однако то же самое нельзя сказать о значениях  $\epsilon_{\perp}$  в нематической фазе смесей  $\{9\}/\{2\}$ , которые подчиняются отмеченному закону (см.(7)). В этом последнем, как и в предыдущем фактах легко убедиться, проведя расчеты с использованием полученных значений  $\epsilon_{\perp}$  для компонентов (рис.1) и их смесей (рис.4).

## ЛИТЕРАТУРА

1. А.С.Сонин. Введение в физику жидких кристаллов. М., Наука, 1983.
2. Г.Фрелих. Теория диэлектриков. М., ИЛ, 1960.

3. Л.М.Блинов. Электро- и магнитооптика жидких кристаллов. М., Наука, 1978.
4. T.R.Bose, D.Ghosh, M.K.Roy, M.Saha. Mol. Cryst. Liq. Cryst., 142, 41 (1987).
5. А.Ц.Саркисян, З.В.Багдасарян, К.К.Варданян, Л.С.Бежанова, С.М.Яйлоян. Изв. НАН Армении, Физика, 34, 172 (1999).

ՈՐՈՇ ՈՒԺԵՂ ԵՎ ԹՈՒՅԼ ԲԵՎԵՌԱՅԻՆ ՆԵՄԱՏԻԿ ՀԵՂՈՒԿ  
ԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐԻ ԵՎ ԽԱՌՆՈՒՐԳՆԵՐԻ ԴԻԷԼԵԿՏՐԱԿԱՆ  
ԹԱՓԱՆՑԵԼԻՈՒԹՅԱՆ ՎԱՐՔԸ ՓՈՒԱՅԻՆ ԱՆՅՈՒՄՆԵՐԻ  
ՄՈՏԱԿԱՅՔՈՒՄ

Ա.Ց. ՍԱՐԿՍՅԱՆ, Չ.Վ. ԲԱԳԴԱՍԱՐՅԱՆ, Կ.Կ. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ,  
Լ.Ս. ԲԵՇՎԱՆՈՎԱ, Ս.Մ. ՅԱՅԼՈՅԱՆ

Կատարված է ուժեղ և թույլ բևեռային նեմատիկ հեղուկ բյուրեղների և նրանց խառնուրդների դիէլեկտրական թափանցելիության վրա մոլեկուլային կառուցվածքի և փուլային անցումների ունեցած ազդեցության հետազոտություն: Ցույց է տրված, որ նեմատիկների դիէլեկտրական թափանցելիության լայնական բաղադրիչի թռչյրները նեմատիկ-իզոտրոպ հեղուկ փուլային անցման ժամանակ պայմանավորված են հարևան մոլեկուլների լայնական դիպոլների գուգահեռ դասավորման աճող կողմնորոշմամբ: Հաստատված է սնեկտիկ և հետադարձ նեմատիկ մեզափուլերի կազմավորումը ուժեղ և թույլ բևեռային նեմատիկների բինար խառնուրդներում: Հաստատված է նաև բինար խառնուրդների մեզափուլերի ջերմակայունության կախվածությունը բաղադրիչների կոնցենտրացիայից և մոլեկուլային կառուցվածքից:

PHASE TRANSITION BEHAVIOR OF DIELECTRIC CONSTANT  
OF CERTAIN STRONGLY AND WEAKLY POLAR  
NEMATIC LIQUID CRYSTALS AND THEIR MIXTURES

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

The influence of molecular structure and phase transitions on the dielectric constant of strongly and weakly polar nematic liquid crystals (NLC) and their binary mixtures is investigated. The discontinuities of transverse component of the nematics' dielectric constant in the phase transition from NLC to isotropic liquid are shown to be caused by the increasing degree of parallel orientation of transverse dipoles of neighboring molecules. The formation of smectic and reentrant nematic mesophases in binary mixtures of strongly and weakly polar NLC is established. The dependence of thermostability of binary mixture mesophases on the concentration and molecular structure of components is also found.

УДК 541.64

## ГАМИЛЬТониан и характеристическое уравнение для обобщенной модели перехода спираль-клубок с учетом стекинга

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

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 16 января 2002 г.)

Построен гамильтониан, описывающий влияние взаимодействия ближайших соседей в обобщенной модели полипептидной цепи. Этот гамильтониан моделирует вклад стекинг-взаимодействий на фоне кооперативности, сформированной энтропийной невыгодностью петель малой длины. Полученные трансфер-матрица и характеристическое уравнение для данного гамильтониана имеют схожую структуру с трансфер-матрицей и характеристическим уравнением исходной модели. Рассмотрено влияние стекинг-взаимодействий на температуру и интервал плавления. Показано, что стекинг приводит к увеличению стабильности двойной спирали и уменьшению кооперативности.

Ранее [1,2] была сформулирована модель и построен гамильтониан для описания перехода спираль-клубок в двухцепочечной ДНК. Гамильтониан такой модели основан только на факте комплементарного спаривания азотистых оснований. Кооперативность системы обеспечивается неаддитивностью петлевого фактора, все остальные виды взаимодействий в данном гамильтониане не рассматриваются. В этих работах было также показано, что двухцепочечная система может быть описана и в рамках «обобщенной модели полипептидной цепи» [3,4] с гамильтонианом Поттс-подобной модели. Таким образом, наша модель рассматривает проблему кооперативности ДНК с нетрадиционных позиций, определяя ее только через неаддитивность петлевого фактора, в то время как общепринятый подход определяет кооперативность через так называемые «стекинг-взаимодействия». Суть стекинга проста. Азотистые основания, будучи плоскими гетероциклическими гидрофобными соединениями, имеют тенденцию к упорядочению наподобие стопки (stacking) монет – столбиком.

Целью настоящей работы является учет «стекинг-взаимодействий» ближайших соседей в рамках гамильтониана нашей модели и выявление роли этого типа взаимодействий на фоне водородных связей.

Гамильтониан нашей модели имеет вид [3,4]

$$-\beta H = J \sum_{i=1}^N \prod_{k=\Delta-1}^0 \delta(\gamma_{i-k}, 1) = J \sum_{i=1}^N \delta_i^{(\Delta)}. \quad (1)$$

Здесь  $\gamma = 1, 2, \dots, Q$  есть спиновая переменная, имеющая смысл номера конформации,  $J = U/kT$  – приведенная энергия образования водородной связи,  $\Delta$  – число повторяющихся единиц, фиксированных одной водородной связью.

Характеристическое уравнение для системы с гамильтонианом (1) имеет вид

$$\lambda^{\Delta-1} (\lambda - (V+1)) (\lambda - Q) = V(Q-1). \quad (2)$$

Поскольку смысл гамильтониана (1) заключается в том, что энергия водородной связи выделяется тогда и только тогда, когда  $\Delta$  подряд повторяющихся единиц находятся в конформации номер 1, определенной как спиральная конформация, то, следовательно, в гамильтониан такой модели, помимо базового члена (1), будет включен новый член, определяемый базовой моделью с  $\Delta = 2$ . Таким образом, гамильтониан системы с учетом стекинга будет иметь вид

$$-\beta H = \sum_{i=1}^N (J \delta_i^{(\Delta)} + I \delta_i^{(2)}). \quad (3)$$

Здесь  $J$ , как и прежде, является приведенной энергией образования водородной связи и фиксирует в конформации номер 1  $\Delta$  последовательных повторяющихся единиц, а  $I = E/kT$  есть приведенная энергия стекинг-взаимодействия и фиксирует в конформации 1 две последовательные повторяющиеся единицы.

Характеристическое уравнение для гамильтониана (3) будет иметь следующий вид:

$$\lambda^{\Delta-2} (\lambda - W) (\lambda - \tilde{Q}) (\lambda - \tilde{R}) = R^{\Delta-2} (W - R) (Q - 1), \quad (4)$$

где  $W = \exp(J+I)$ ,  $R = \exp I$ ,  $VR = W - R$ ,

$$\begin{aligned} \tilde{Q} &= Q + \left( \sqrt{(Q-R+1)^2 / 4 + R - 1} - (Q-R+1)/2 \right), \\ \tilde{R} &= R - 1 - \left( \sqrt{(Q-R+1)^2 / 4 + R - 1} - (Q-R+1)/2 \right). \end{aligned} \quad (5)$$

Очевидно, что при  $I = 0$ ,  $R = 1$  (4) переходит в (2).

Рассмотрим случай, когда энергии стекинга и энергии водородной связи одного порядка. Поскольку переход спираль-клубок происходит в узком температурном интервале, соответствующем  $W \approx Q$ , то, следовательно, можно принять  $W \approx R^2 \approx Q$ . Отсюда следует [1,2], что при  $Q \approx 3$  величина  $\tilde{R}$  становится близкой к нулю. Таким образом, в левой

части векового уравнения (4) можно ею пренебречь и переписать его в виде

$$\lambda^{\Delta-1}(\lambda - W)(\lambda - \tilde{Q}) = W^{(\Delta-2)/2}(W-1)(Q-1). \quad (6)$$

Сравнивая (6) и (2), мы замечаем, что роль температурного параметра  $V+1 = \exp J$  играет  $W = \exp(J+I)$ , а правая часть содержит дополнительный множитель  $R^{\Delta-2}$ . Для выявления роли стекинга приведем (2) и (6) к зимм-брэгговскому виду

$$(x-1)(x-s) = s\sigma. \quad (7)$$

Для этого в уравнении (2) сделаем подстановку  $\lambda = x(V+1)$ ,  $s = Q/(V+1)$ , а в уравнении (6)  $\lambda = xW$ ,  $s = Q/W$  и, учитывая, что вблизи точки перехода  $s=1$  и  $x \approx 1$ , вековые уравнения (2) и (6) перепишутся соответственно как

$$(x-1)(x-s) = (s-1/Q)(Q-1)/Q^{\Delta-1}, \quad (8)$$

$$(x-1)(x-s) = (s-1/Q)(Q-1)/Q^{(\Delta-1)/2}. \quad (9)$$

Из этих уравнений видно, что с одной и той же точностью до величины  $1/Q$  оба вековых уравнения сводятся к зимм-брэгговскому виду. Точка перехода, определяемая для базового гамильтониана как  $V+1=Q$  или  $T_c = U/\ln Q$ , для гамильтониана со стекингом будет определяться  $W=Q$  или  $T_c = (U+E)/\ln \tilde{Q}$ . Поскольку  $\tilde{Q}$  незначительно отличается от  $Q$ , то стекинг-взаимодействие действительно увеличивает температуру перехода, что естественно, поскольку мы учли дополнительный вклад, стабилизирующий спиральную структуру. Иное дело с параметром кооперативности. В отличие от базовой модели, он уменьшается, что приводит к увеличению интервала перехода. Во всех среднеполевых теориях кооперативность определялась именно стекинг-взаимодействием. Этот парадоксальный результат требует дальнейшего внимательного рассмотрения. Однако и сейчас можно с определенностью сказать, что на фоне сильной кооперативности, определяемой невыгодностью петель малой длины, вклад стекинга может привести только к потере однородности петли, и, следовательно, к потере кооперативности.

Работа выполнена благодаря гранту CRDF AB2-2006.

## ЛИТЕРАТУРА

1. В.Ф.Морозов, Е.Ш.Мамасакхлисов, М.С.Шагиян. Изв. НАН Армении. Физика, 33, 195 (1998).
2. V.F.Morozov, E.Sh.Mamasakhlisov, Sh.Nayryan, Chin-Kun Hu. Physica A, 281, 51 (2000).
3. N.S.Ananikyan, Sh.A.Nayryan, E.Sh.Mamasakhlisov, V.F.Morozov. Biopolymers 30, 357 (1990).
4. Sh.A.Nayryan, E.Sh.Mamasakhlisov, V.F.Morozov. Biopolymers, 35, 75 (1995).

ԲՈՎԱՆԴԱԿՈՒԹՅՈՒՆ

Ա.Ս.Քոթանջյան, Ա.Ա.Սահարյան. Գիլեկտրական զլանի ներսում պտտվող էլեկտրոնի ճառագայթումը . . . . .	263
Ո.Ա.Ալանակյան. Տրիպլետ Հիգսի բոզոնների և իրենց սուպերպարտնյորների կապված վիճակների էներգիայի մակարդակների ուղղումները . . . . .	273
Գ.Մ.Սեդրակյան, Ա.Ժ.Խաչատրյան. Յրման կոմպլեքս ամպլիտուդի մեթոդը րվանտային մեխանիկայում . . . . .	282
Ն.Ա.Չանունց. Մակերևութային պլազմոն-պոլյարիտոնի գերֆոկուսացումը սեսայաձև կառուցվածքում . . . . .	293
Ա.Լ.Հարությունյան. Կուլոնյան ճեղքի ազդեցությունն $A^{III}B^V$ տիպի թույլ լեզիրված և թույլ համակշռված կիսահաղորդչի հիմնարար կանման եզրի նուրբ կառուցվածքի վրա . . . . .	297
Ա.Վ.Մելքոնյան. Հոսանքի հավասարակշիռ $1/f$ ֆլուկտուացիաների սպեկտրայ խտությունը համասեռ կիսահաղորդչներում . . . . .	303
Ո.Մ.Աբրահամյան, Գ.Հ.Քաղալյան. Օկտոգենի $\alpha$ - և $\beta$ -մոդիֆիկացիաների ցանցերի էներգիաների հաշվարկը . . . . .	307
Ա.Յ.Սարգսյան, Ջ.Վ.Քաղդասարյան, Կ.Կ.Վարդանյան, Լ.Ս.Քեժանովա, Ա.Մ.Յայլոյան. Որոշ ուժեղ և թույլ բևեռային նեմատիկ հեղուկ բյուրեղների և խառնուրդների դիլեկտրական թափանցելիության վարքը փուլային անցումների մոտակայքում . . . . .	311
Ա.Վ.Քաղասյան, Ա.Վ.Գրիգորյան, Ա.Յու.Չուխաջյան, Յ.Շ.Մամասախիսով, Վ.Ֆ.Մորոզով. Պարույր-կծիկ անցման ընդհանրացված մոդելի համիլտոնիանը և բնութագրական հավասարումը, հաշվի առնելով ստեքինգ փոխազդեցությունը . . . . .	320

CONTENTS

A.S.Kotanjyan, A.A.Saharian. Radiation from an electron rotating inside a dielectric cylinder . . . . .	263
R.A.Alanakyann. Corrections to energy levels of bound states of triplet Higgs bosons and their superpartners . . . . .	273
D.M.Sedrakian, A.Zh.Khachatryan. Method of complex scattering amplitude in quantum mechanics . . . . .	282
N.A.Janunts. Superfocusing of a surface plasmon-polariton in a wedge-like structure . . . . .	293
S.L.Haroutunian. Influence of a Coulomb gap on the fine structure of the fundamental absorption edge in low-doped and low-compensated $A^{III}B^V$ semiconductors . . . . .	297
S.V. Melkonyan. Spectral density of current equilibrium $1/f$ fluctuations in homogeneous semiconductors . . . . .	303
R.M.Abrahamian, D.H.Badalyan. Lattice energy calculations for $\alpha$ - and $\beta$ -modifications of octogen . . . . .	307
A.Ts.Sarkissyan, Z.V.Baghdasaryan, K.K.Vardanyan, L.S.Bezhanova, S.M.Yayloyan. Phase transition behavior of dielectric constant of certain strongly and weakly polar nematic liquid crystals and their mixtures . . . . .	311
A.V.Badasyan, A.V.Grigoryan, A.Y.Chuhadjyan, E.Sh.Mamasakhlisov, V.F.Morozov. Hamiltonian and secular equation for generalized model of helix-coil transition with allowance for stacking . . . . .	320

## СОДЕРЖАНИЕ

А.С.Котанджян, А.А.Саарян. Излучение электрона, вращающегося внутри диэлектрического цилиндра. . . . .	263
Р.А.Аланиян. Поправки к уровням энергии связанных состояний триплетных хиггсовских бозонов и их суперпартнеров. . . . .	273
Д.М.Седракян, А.Ж.Хачатрян. Метод комплексной амплитуды рассеяния в квантовой механике. . . . .	282
Н.А.Джануни. Сверхфокусировка поверхностного плазмон-поляритона в клинообразной структуре. . . . .	293
С.Л.Арутюнян. Влияние кулоновской щели на тонкую структуру края фундаментального поглощения в полупроводниках типа $A^{III}B^V$ в условиях слабого легирования и слабой компенсации. . . . .	297
С.В.Мелконян. Спектральная плотность равновесных $1/f$ -флуктуаций тока в однородных полупроводниках. . . . .	303
Р.М.Абрамян, Д.А.Бадалян. Расчет энергии решеток $\alpha$ - и $\beta$ -модификаций октогена. . . . .	307
А.Ц.Саркисян, З.В.Багдасарян, К.К.Варданян, Л.С.Бежанова, С.М.Яйлоян. Поведение диэлектрической проницаемости некоторых сильно- и слабополярных нематических жидких кристаллов и их смесей вблизи фазовых переходов . . . . .	311
А.В.Бадасян, А.В.Григорян, А.Ю.Чухаджян, Е.Ш.Мамасакхлисов, В.Ф.Морозов. Гамильтониан и характеристическое уравнение для обобщенной модели перехода спираль-клубок с учетом стекинга. . . . .	320

Заказ №197. Тираж 200.

Сдано в набор 15.09.2002. Подписано к печати 21.09.2002.

Печ. л. 4,0. Бумага офсетная. Цена договорная.

Типография издательства "Гитутюн" НАН РА.

375019, Ереван, пр. Маршала Баграмяна, 24.