ISSN 0002-3035

ФИЗИКА · ՖԻԶԻԿԱ · PHYSICS

ИЗВЕСТИЯ
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК АРМЕНИИ

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ
ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ

PROCEEDINGS
OF NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF ARMENIA

38, N2, 2003

ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ՀԱՆՐԱՊԵՏՈՒԹՅԱՆ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱ
НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК РЕСПУБЛИКИ АРМЕНИЯ

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ ИЗВЕСТИЯ
ՖԻԶԻԿԱ ФИЗИКА

ՀԱՏՈՐ ТОМ
38

№ 2

ՀՀ ԳԱԱ «ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆ» ՀՐԱՏԱՐԱԿՉՈՒԹՅՈՒՆ ИЗДАТЕЛЬСТВО "ГИТУТЮН" НАН РА
ԵՐԵՎԱՆ ЕРЕВАН
2003

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

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

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

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

К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Известия НАН Армении, Физика, т.38, №2, с.71-77 (2003)

УДК 535.016

РЕШЕНИЯ ОДНОМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА В ФУНКЦИЯХ ЭЙРИ

А.М. ИШХАНЯН

Инженерный центр НАН Армении

(Поступила в редакцию 1 ноября 2002 г.)

Представлены два новых семейства потенциалов, обладающих дискретным энергетическим спектром, для которых точное решение одномерного стационарного уравнения Шредингера задается в функциях Эйри. Найдены соответствующие уровни энергии и стационарные волновые функции квантовой системы, движущейся в полях с данными потенциалами.

1. Введение

Нахождение энергетического спектра и соответствующих волновых функций физической системы, управляемой стационарным уравнением Шредингера

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+(E-U)\psi=0 \qquad (1)$$

с подходящим потенциалом $U(x)$, является одним из основных задач нерелятивистской квантовой механики. К сожалению, известны лишь немногочисленные специфические виды потенциалов, для которых решение задачи находится точно. Среди всех интегрируемых случаев особое значение имеют четыре семейства, когда решение определяется через гипергеометрические функции Гаусса [1,2] (члены класса Натанзона [3]) и еще четыре семейства, когда решение задается с помощью вырожденных гипергеометрических функций [1,2] (класс вырожденных натанзоновских потенциалов [3]). Три из последних четырех семейств (а именно, обобщенный гармонический осциллятор или потенциал Гольдмана-Кривченко, обобщенный кулоновский потенциал, включающий в себя центробежный барьер, и обобщенный осциллятор Морзе), как известно, обладают дискретным спектром. В четвертом же случае, в задаче о движении частицы в однородном поле с потенциалом $U=F_0x$, из-за отсутствия потенциальной ямы локализация системы невозможна. Интересно, что в данном случае решение можно выразить в функциях Эйри, которые можно представить как специфическую комбинацию двух обобщенных гипергеометрических функций (см., например, [4]):

$$\mathrm{Ai}(z)=\frac{1}{3^{2/3}\Gamma(2/3)}\cdot{}_0F_1\left(;\frac{2}{3};\frac{z^3}{9}\right)-\frac{1}{\sqrt[3]{3}\Gamma(1/3)}\cdot{}_0F_1\left(;\frac{4}{3};\frac{z^3}{9}\right). \quad (2)$$

Это обстоятельство, вносящее некоторую разницу между данным классом и всеми остальными, служит стартовой точкой настоящей работы. Как будет показано ниже, поиск решений уравнения Шредингера с подобной структурой выявляет еще одно семейство, определяющее потенциальные ямы. Далее, мы применяем преобразование Дарбу [5] к потенциалу однородного поля и получаем другое семейство, которое также задает потенциальные ямы, но другой формы. На больших расстояниях потенциалы первого семейства стремятся к нулю, в то время как потенциалы второго семейства ведут себя примерно как $U \sim F_0 x$. (Очевидно, что потенциалы последнего семейства могут быть применены в задачах, где на систему наложено внешнее однородное поле, например, гравитационное или магнитное.) Ниже мы представляем общее решение задачи, определяем стационарные состояния и соответствующие энергетические спектры. Уровни энергии оказываются неэквидистантными и проявляют необычную зависимость от главного квантового числа.

2. Первое семейство

Новый класс потенциалов, допускающих решение уравнения Шредингера (1) в функциях Эйри, можно найти, применив стандартную замену зависимой и независимой переменных [3,6]:

$$\psi(x)=\varphi(z)u(z), \quad z=z(x) \quad \Leftrightarrow \quad dz/dx=\rho(z), \quad (3)$$

и потребовав совпадения полученного уравнения с несколько видоизмененным, для удобства, уравнением Эйри [4]

$$u_{zz}-s^3(z+z_0)u=0. \quad (4)$$

В результате получится следующая система уравнений:

$$2\frac{\varphi_z}{\varphi}+\frac{\rho_z}{\rho}=0, \quad (5)$$

$$\frac{\varphi_{zz}}{\varphi}+\frac{\rho_z}{\rho}\frac{\varphi_z}{\varphi}+\frac{\varepsilon-V}{\rho^2}=-s^3(z+z_0), \quad (6)$$

где введены обозначения

$$\varepsilon=2mE/\hbar^2, \quad V=2mU/\hbar^2. \quad (7)$$

Тривиальное решение этой системы, $\rho=\varphi=1$, задает известный потенциал однородного поля $V=V_0+V_1x$. Другое решение получается, если положить $\rho = 2/(3\sqrt{z})$. Нетрудно проверить, что тогда получим семейство потенциалов

$$V = V_0 + \frac{V_1}{x^{2/3}} - \frac{5/36}{x^2}, \tag{8}$$

встречающихся при изучении взаимодействия кварк–антикварк.

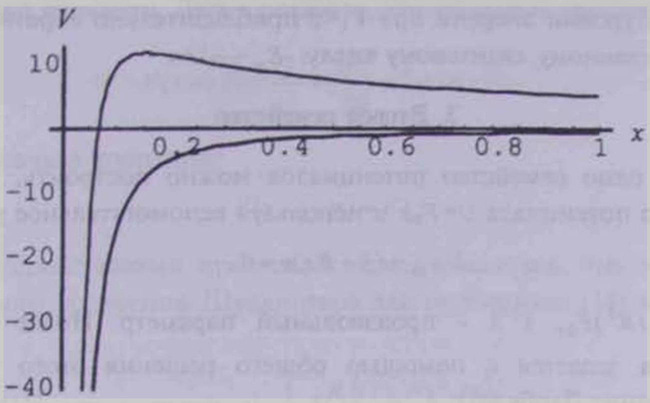

Рис. 1. Потенциалы (8) при $V_0=0$: $V_1=5$ – верхняя кривая, $V_1=-0.1$ – нижняя кривая.

Качественный вид этих потенциалов показан на рис.1.

Соответствующее общее решение уравнения Шредингера (1) при $V_0-\varepsilon\neq 0$ имеет вид

$$\psi = x^{1/6}\left(C_1 \mathrm{Ai}[s(x^{2/3}+z_0)] + C_2 \mathrm{Bi}[s(x^{2/3}+z_0)]\right),$$
$$s = \left[9(V_0-\varepsilon)/4\right]^{1/3}, \quad z_0 = V_1/(V_0-\varepsilon), \tag{9}$$

а при $V_0-\varepsilon=0$

$$\psi_0 = x^{1/6}\left[C_1 \exp[-3/2\sqrt{V_1}\, x^{2/3}] + C_2 \exp[+3/2\sqrt{V_1}\, x^{2/3}]\right]. \tag{10}$$

Определим уровни энергии. Легко видеть, что при $V_0=0$ дискретный спектр возможен только для отрицательных энергий. При этом аргумент функций Эйри в (9) при $x\to+\infty$ стремится к $+\infty$ и ввиду экспоненциального роста функции Bi следует положить $C_2=0$. Тогда условие квадратичной интегрируемости радиальной волновой функции ψ/x [1] (или эквивалентное условие $\lim_{x\to 0}(\psi/\sqrt{x})=0$, см. [7]), так как $\psi(x\to 0)\sim C_1[\mathrm{Ai}(sz_0)x^{1/6} + (3/2)^{2/3}\mathrm{Ai}'(sz_0)x^{5/6}]$, сводится к следующему уравнению для определения энергетического спектра:

$$\mathrm{Ai}(s z_0) = \mathrm{Ai}\left[V_1\left(\frac{3}{-2\varepsilon}\right)^{2/3}\right] = 0. \tag{11}$$

В результате, с учетом известного разложения для нулей функции Эйри (см.[4]), получаются следующие уровни энергии (должно быть $V_1<0$):

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{(-V_1)^{3/2}/\pi}{n-1/4}\left(1+\frac{5}{48}\frac{1}{\xi^2}-\frac{5}{36}\frac{1}{\xi^4}+\frac{77125}{82944}\frac{1}{\xi^6}+...\right)^{-3/2}, \quad (12)$$

где $\xi = 3\pi(4n-1)/8$, n=1,2,3.... С точностью до одного процента, можно пользоваться только первым членом разложения. Таким образом, можно считать, что уровни энергии при $V_1<0$ приблизительно обратно пропорциональны главному квантовому числу: $E_n \sim -1/n$.

3. Второе семейство

Еще одно семейство потенциалов можно построить, исходя из однородного потенциала $U=F_0x$ и используя вспомогательное уравнение

$$v_{xx}+(\lambda - Fx)v = 0, \quad (13)$$

где $F=(2m/\hbar^2)F_0$, а λ – произвольный параметр. Новое семейство потенциалов задается с помощью общего решения этого уравнения (преобразование Дарбу [5]):

$$V = Fx - 2\left(\frac{v_x}{v}\right)_x, \quad (14)$$

$$v = V_1\mathrm{Ai}\left(\frac{Fx-\lambda}{F^{2/3}}\right)+V_2\mathrm{Bi}\left(\frac{Fx-\lambda}{F^{2/3}}\right), \quad (15)$$

где V_1, V_2 – произвольные постоянные. Качественный вид потенциала (14) приведен на рис.2.

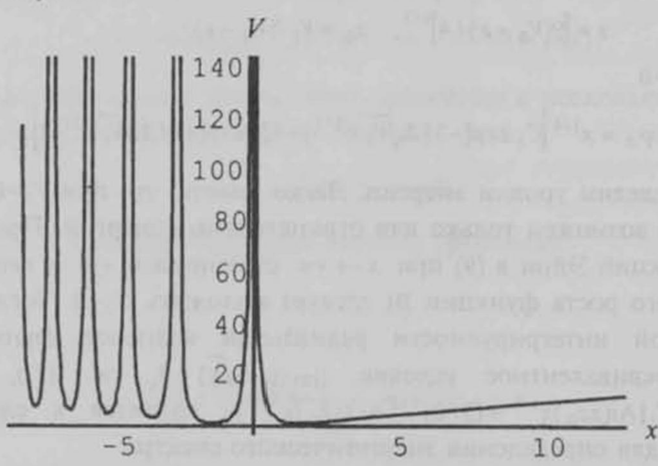

Рис.2. Вид потенциала (14) при $V_1 = -\sqrt{3}V_2$, λ=0.

Как видно, имеется ряд потенциальных ям. Для того, чтобы первая справа потенциальная яма лежала в области x>0, следует, например, в формуле (15) выбрать $V_1=-\sqrt{3}V_2$, $\lambda=0$. Тогда полученный класс потенциалов будет определяться формулой

$$V=-Fx+\frac{2}{x^2}\left(\frac{{}_0F_1\left(1/3,Fx^3/9\right)}{{}_0F_1\left(4/3,Fx^3/9\right)}\right)^2, \tag{16}$$

где ${}_0F_1$ – обобщенная гипергеометрическая функция, имеющая лишь один нижний параметр. Легко показать, что на малых расстояниях

$$V(x\to 0)\approx\frac{2}{x^2}+\frac{5F^2}{56}x^4+O(x^7), \tag{17}$$

а вдали от начала координат

$$V(x\to+\infty)\approx Fx. \tag{18}$$

Непосредственной проверкой можно убедиться, что общее решение исходного уравнения Шредингера для потенциала (16) задается выражением

$$\psi=F^{1/3}\left[C_1\mathrm{Ai}'(\chi)+C_2\mathrm{Bi}'(\chi)\right]-\frac{1}{z}\frac{{}_0F_1\left(1/3,Fx^3/9\right)}{{}_0F_1\left(4/3,Fx^3/9\right)}\left[C_1\mathrm{Ai}(\chi)+C_2\mathrm{Bi}(\chi)\right], \tag{19}$$

где $\chi=(Fx-\varepsilon)/F^{2/3}$.

Определим стационарные состояния системы в первой справа потенциальной яме. Так как функции Эйри второго рода $\mathrm{Bi}(x)$ и $\mathrm{Bi}'(x)$ неограниченно растут при $x\to+\infty$, следует положить $C_2=0$. Тогда второе граничное условие, $\psi(x\to 0)=0$, приводит к простому уравнению для определения энергетического спектра:

$$\mathrm{Ai}\left(\frac{-\varepsilon}{F^{2/3}}\right)=0. \tag{20}$$

Таким образом, уровни энергии системы в первой справа потенциальной яме (16) соответствуют нулям функции Эйри. Вновь пользуясь известным разложением для нулей функции Эйри (см.[4]), получаем следующее окончательное выражение:

$$E_n=\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{1/3}\left(\frac{3\pi F_0}{8}(4n-1)\right)^{2/3}\left(1+\frac{5}{48}\frac{1}{\xi^2}-\frac{5}{36}\frac{1}{\xi^4}+\frac{77125}{82944}\frac{1}{\xi^6}+\ldots\right), \tag{21}$$

где $\xi=3\pi(4n-1)/8$, $n=1,2,3\ldots$ Отметим, что, как и в предыдущем случае, уже первый член этого разложения определяет энергетический спектр с ошибкой менее 1%. Как непосредственно видно из формулы (21), зависимость уровней энергии от номера n имеет вид $E_n\sim n^{2/3}$. Подобная структура энергетических уровней не имеет известных аналогов. Волновые функции основного (n=1) и первого возбужденного (n=2) состояний приведены на рис.3.

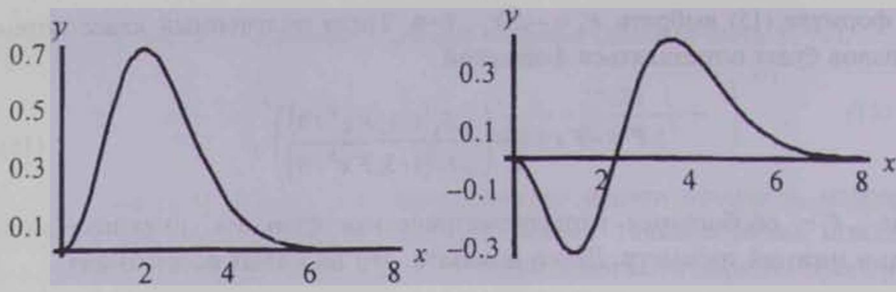

Рис.3. Волновые функции первых двух уровней энергии при потенциале (16).

4. Заключение

Таким образом, мы представили два новых семейства потенциалов, для которых решение одномерного стационарного уравнения Шредингера задается с помощью функций Эйри. Как непосредственно видно из (8) и (17), коэффициенты асимптотик потенциалов в нуле строго зафиксированы и, следовательно, данные потенциалы относятся к так называемому, по терминологии [7,8], классу "условно" интегрируемых моделей. Мы построили общее решение задачи и нашли стационарные состояния системы. (Следует отметить, что приведенное в работе [8] решение задачи о связанных состояниях частицы в поле потенциала (8), как показано в [7], в силу применения некорректных граничных условий, неверно.) Полученные энергетические спектры по виду зависимости от главного квантового числа существенно отличаются от ранее известных типов.

Работа выполнена при поддержке грантов Фонда гражданских исследований и разработок США (CRDF) No.NFSAT PH 100-02/12042 и Армянского Национального Фонда Науки и Образования (ANSEF) No.PS13.

ЛИТЕРАТУРА

1. **L.D.Landau and E.M.Lifshitz.** Quantum Mechanics. Oxford, Pergamon Press, 1981.
2. **I.I.Gol'dman and V.D.Krivchenkov.** Problems in Quantum Mechanics. New York, Dover, 1993.
3. **Г.А.Натанзон.** Ж. Теор. Мат. Физ., **38**, 146 (1979); **Г.А.Натанзон.** Вестник ЛГУ, **10**, 22 (1971); **P. Cordero and S. Salamo**. J. Phys. A, **24**, 5299 (1991).
4. **M.Abramowitz and I.A.Stegun.** Handbook of Mathematical Functions. New York, Dover, 1965; **L.J.Slater.** Generalized Hypergeometric Functions. Cambridge, Cambridge University Press, 1966.
5. **G.Darboux.** Compt. Rend. Acad. Sci. Paris, **94**, 1343 (1882); **V.B.Matveev and M.A.Salle.** Darboux transformations and solitons. Berlin, Springer, 1991.
6. **A.M.Ishkhanyan.** Optics Commun., **176**, 155 (2000); **A.M.Ishkhanyan and K.-A.Suominen.** J. Phys. A, **34**, 6301 (2001).
7. **M.Znojil.** Phys. Rev. A, **61**, 066101 (2000); **C.Grosche**. J. Phys A, **28**, 5889 (1996); **C.Grosche**. J. Phys A, **29**, 365 (1996).
8. **A. de Souza Dutra.** Phys. Rev. A, **47**, R2435 (1993).

ՇՐՅՈԴԻՆԳԵՐԻ ՄԻԱՉԱՓ ՀԱՎԱՍԱՐՄԱՆ ԼՈՒԾՈՒՄՆԵՐԸ ԷՅՐԻԻ ՖՈՒՆԿՑԻԱՆԵՐՈՎ

Ա.Մ. ԻՇԽԱՆՅԱՆ

Ներկայացված է դիսկրետ էներգիական սպեկտր ունեցող պոտենցյալների երկու նոր ընտանիք, որոնց համար Շրյոդինգերի միաչափ ստացիոնար հավասարման ճշգրիտ լուծումները տրվում են Էյրիի ֆունկցիաներով: Գտնված են տվյալ պոտենցյալների դաշտում շարժվող քվանտային համակարգի էներգիայի մակարդակները եւ ստացիոնար ալիքային ֆունկցիաները:

SOLUTIONS OF THE ONE-DIMENSIONAL SCHRÖDINGER EQUATION IN TERMS OF AIRY FUNCTIONS

A.M. ISHKHANYAN

Two new families of potentials having discrete energy spectrum, for which the exact solutions to the one-dimensional stationary Schrödinger equation are given in terms of Airy functions, are presented. The corresponding energy levels and stationary wave functions are found for quantum systems moving in the field of these potentials.

Известия НАН Армении, Физика, т.38, №2, с.78-86 (2003)

УДК 530.145

КУЛОН-ОСЦИЛЛЯТОРНАЯ ДУАЛЬНОСТЬ И 5-МЕРНАЯ ЗАДАЧА КУЛОНА

Х.Г. КАРАЯН, Л.Г. МАРДОЯН, В.М. ТЕР-АНТОНЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 5 июня 2002 г.)

Показано, что преобразование Гурвица связывает задачу восьмимерного осциллятора с 5-мерной задачей Кулона. Дан анализ 5-мерной задачи Кулона в гиперсферических и параболических координатах. Вычислены сферический и параболический базисы этой системы, выведены представления Парка и Тартера для коэффициентов сферо-параболических и парабола-сферических межбазисных разложений.

1. Введение

Хорошо известно [1], что задача об атоме водорода – в силу скрытой симметрии – факторизуется не только в сферических, но и в параболических координатах. Наличие параболического базиса позволяет построить теорию эффекта Штарка в атоме водорода [2] и развить точную теорию рассеяния заряженных частиц кулоновским полем ядра [3].

Согласно принципу суперпозиции состояний, более привычный сферический базис должен быть линейной комбинацией состояний, образующих параболические состояния. Использование этих линейных комбинаций сильно упрощает многие вычисления, относящиеся к теории водородоподобных атомов. Коэффициенты указанной выше суперпозиции состояний были вычислены в координатном представлении Тартером [4], а их связь с группой скрытой симметрии атома водорода была установлена Парком [5], доказавшим, что коэффициенты Тартера выражаются через коэффициенты Клебша-Гордана группы $SU(2)$.

В настоящей работе рассмотрена кулоновская задача в пятимерном евклидовом пространстве R^5. Поводом к такому исследованию послужил сравнительно недавно установленный факт (названный кулон-осцилляторной дуальностью), согласно которому 8-мерный изотропный осциллятор со связью (о которой будет сказано ниже) дуален 5-мерной кулоновской задаче в дискретном спектре. Это свойство является частным случаем более общего утверждения, гласящего, что 8-мерный изотропный осциллятор (без дополнительной связи) дуален связанной системе заряд–дион. Напомним, что дион в R^5 – это гипотетическая частица, которая является источником как электрического, так и неабелева магнитного поля [6-9]. Подобные объекты предсказываются современными схемами великого объединения [10,11].

Статья построена следующим образом. В §2 дано краткое описание аргументов, приводящих к кулон-осцилляторной дуальности. В §3 получены волновые функции 5-мерной кулоновской задачи (для связанных состояний) в гиперсферических и параболических координатах определенных типов. В §4 выведена формула, обобщающая результат Парка – Тартера на случай R^5. В заключении мы возвращемся к дион-осцилляторной дуальности и приводим дополнительную информацию, относящуюся к этому в высшей степени интересному свойству.

2. Кулон-осцилляторная дуальность

Рассмотрим преобразование Гурвица [12]:

$$
\begin{aligned}
x_0 &= u_0^2 + u_1^2 + u_2^2 + u_3^2 - u_4^2 - u_5^2 - u_6^2 - u_7^2 \,, \\
x_2 + ix_1 &= 2\left[(u_0 + iu_1)(u_5 + iu_4) + (u_2 - iu_3)(u_7 - iu_6)\right] , \\
x_4 + ix_3 &= 2\left[(u_0 + iu_1)(u_7 + iu_6) - (u_2 - iu_3)(u_5 - iu_4)\right] .
\end{aligned}
\tag{1}
$$

Здесь u_μ $(\mu = 0,1,...,7)$ – координаты пространства $R^8(u_\mu)$, а x_i $(i = 0,1,...,4)$ – пространства $R^5(x_i)$. Из (1) легко заметить, что имеет место равенство

$$
\begin{aligned}
u^4 &= \left(u_0{}^2 + u_1{}^2 + u_2{}^2 + u_3{}^2 + u_4{}^2 + u_5{}^2 + u_6{}^2 + u_7{}^2\right)^2 = \\
&= x_0{}^2 + x_1{}^2 + x_2{}^2 + x_3{}^2 + x_4{}^2 = r^2 \,,
\end{aligned}
\tag{2}
$$

которое называется тождеством Эйлера. Согласно [12] связь между операторами Лапласа в пространствах $R^8(u_\mu)$ и $R^5(x_i)$ имеет вид

$$
\Delta_8 = 4r\Delta_5 - \frac{4}{r}\hat{J}^2 \,, \tag{3}
$$

где $\hat{J}^2 = \hat{J}_1{}^2 + \hat{J}_2{}^2 + \hat{J}_3{}^2$, а

$$
\hat{J}_1 = \frac{i}{2}\left(u_1 \frac{\partial}{\partial u_0} - u_0 \frac{\partial}{\partial u_1} + u_3 \frac{\partial}{\partial u_2} - u_2 \frac{\partial}{\partial u_3} + u_5 \frac{\partial}{\partial u_4} - u_4 \frac{\partial}{\partial u_5} + u_7 \frac{\partial}{\partial u_6} - u_6 \frac{\partial}{\partial u_7}\right),
$$

$$
\hat{J}_2 = \frac{i}{2}\left(u_2 \frac{\partial}{\partial u_0} - u_3 \frac{\partial}{\partial u_1} - u_0 \frac{\partial}{\partial u_2} + u_1 \frac{\partial}{\partial u_3} - u_6 \frac{\partial}{\partial u_4} + u_7 \frac{\partial}{\partial u_5} + u_4 \frac{\partial}{\partial u_6} - u_5 \frac{\partial}{\partial u_7}\right),
$$

$$
\hat{J}_3 = \frac{i}{2}\left(u_3 \frac{\partial}{\partial u_0} + u_2 \frac{\partial}{\partial u_1} - u_1 \frac{\partial}{\partial u_2} - u_0 \frac{\partial}{\partial u_3} - u_7 \frac{\partial}{\partial u_4} - u_6 \frac{\partial}{\partial u_5} + u_5 \frac{\partial}{\partial u_6} + u_4 \frac{\partial}{\partial u_7}\right).
$$

Пользуясь явным видом операторов $\hat{J}_a$, можно прямым вычислением показать, что они удовлетворяют коммутационным соотношениям $\left[\hat{J}_a, \hat{J}_b\right] = i\varepsilon_{abc}\hat{J}_c$, где $a,b,c = 1,2,3$.

Теперь свяжем 8-мерную задачу изотропного осциллятора

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu_0}\Delta_8 + \frac{\mu_0\omega^2 u^2}{2}\right)\psi(u_\mu) = E\psi(u_\mu), \tag{4}$$

$$E = \hbar\omega(N+4), \qquad N = 0,1,,2,\ldots, \tag{5}$$

где N – главное квантовое число, с 5-мерной задачей Кулона. Так как операторы $\hat{J}_a$ не зависят от координат x_i, допустим, что мы можем волновую функцию $\psi(u_\mu)$ 8-мерного изотропного осциллятора представить в следующем факторизованном виде:

$$\psi(u_\mu) = \psi(x_i)\Phi(\Omega_a), \tag{6}$$

где через Ω_a обозначим углы, от которых зависят операторы $\hat{J}_a$, а $\Phi(\Omega_a)$ является собственной функцией оператора $\hat{J}^2$, т.е.

$$\hat{J}^2\,\Phi(\Omega_a) = J(J+1)\Phi(\Omega_a). \tag{7}$$

Здесь $J(J+1)$ – собственные значения оператора $\hat{J}^2$. Теперь, подставляя в (4) формулу (3) и учитывая соотношения (6) и (7), приходим к уравнению

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu_0}\Delta_5 - \frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2\mu_0 r^2}J(J+1)\right)\psi(x_i) = \varepsilon\psi(x_i), \tag{8}$$

где $\varepsilon = -\mu_0\omega^2/8$, а $4e^2 = E$. Таким образом, мы получили, что 8-мерный изотропный осциллятор дуален бесконечному числу 5-мерных кулоновских систем с дополнительным членом $1/r^2$ и константой связи $\hbar^2 J(J+1)/2\mu_0$. При $J=0$ мы получим уравнение для 5-мерной задачи Кулона:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu_0}\Delta_5 - \frac{e^2}{r}\right)\psi(x_i) = \varepsilon\,\psi(x_i). \tag{9}$$

Условие $J=0$ равносильно требованию $\hat{J}_a\psi(\mathbf{x}) = 0$. Кроме того, из (1) следует, что $\psi(\mathbf{x})$ есть четная функция переменных u_μ: $\psi(x_i(-u_\mu)) = \psi(x_i(u_\mu))$. Поэтому любое решение уравнения (9) $\psi(x_i)$ может быть разложено по полной системе четных решений $\psi_{N\alpha}(u_\mu)$ (α – остальные квантовые числа) уравнения (4), т.е.

$$\psi_n(x_i) = \sum_\alpha C_{n\alpha}\psi_{N\alpha}(u_\mu), \qquad \text{где} \qquad N = 2n. \tag{10}$$

Нетрудно убедиться, что n совпадает с главным квантовым числом 5-мерной задачи Кулона. Действительно, подставляя в (5) соотношения $E = 4e^2$ и (10), получим

$$\omega_n = \frac{2e^2}{\hbar(n+2)}. \quad (11)$$

Таким образом, в нашем случае энергия осциллятора фиксирована и квантуется частота ω. Подставляя теперь (11) в условие $\varepsilon = -\mu_0 \omega^2/8$, приходим к выражению

$$\varepsilon_n = -\frac{\mu_0 e^4}{2\hbar^2 (n+2)^2}, \quad (12)$$

в которое при $d = 5$ переходит формула

$$\varepsilon_n = -\frac{\mu_0 e^4}{2\hbar^2 \left(n + \frac{d-1}{2}\right)^2},$$

справедливая для d-мерной кулоновской задачи [13].

3. 5-мерные сферические и параболические связанные состояния

Как уже было показано, преобразование Гурвица (1) 8-мерный изотропный осциллятор со связью $\hat{J}_a \psi(u_\mu) = 0$ переводит в 5-мерную задачу Кулона (9). Собственные значения энергии (12) вырождены и кратность вырождения равна

$$g_n = \frac{(n+1)(n+3)(n+2)^2}{12}.$$

5-мерные гиперсферические координаты $r \in [0,\infty)$, $\theta \in [0,\pi]$, $\alpha \in [0,2\pi)$, $\beta \in [0,\pi]$, $\gamma \in [0,4\pi)$ в $\mathrm{R}^5(\mathbf{x})$ введем следующим образом:

$$x_0 = r\cos\theta, \quad x_2 + ix_1 = r\sin\theta \sin\frac{\beta}{2} e^{i\frac{\alpha-\gamma}{2}}, \quad x_4 + ix_3 = r\sin\theta\cos\frac{\beta}{2} e^{i\frac{\alpha+\gamma}{2}}. \quad (13)$$

Оператор Лапласа в координатах (13) имеет вид

$$\Delta_5 = \frac{1}{r^4}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^4 \frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 \sin^3\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin^3\theta \frac{\partial}{\partial\theta}\right) - \frac{4}{r^2\sin^2\theta}\hat{L}^2,$$

где

$$\hat{L}^2 = -\left[\frac{\partial^2}{\partial\beta^2} + \cot\beta\frac{\partial}{\partial\beta} + \frac{1}{\sin^2\beta}\left(\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2} - 2\cos\beta\frac{\partial^2}{\partial\alpha\,\partial\gamma} + \frac{\partial^2}{\partial\gamma^2}\right)\right].$$

Компоненты оператора момента $\hat{\mathbf{L}}$ имеют вид

$$\hat{L}_1 = i\left(\cos\alpha\cot\beta\frac{\partial}{\partial\alpha} + \sin\alpha\frac{\partial}{\partial\beta} - \frac{\cos\alpha}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\gamma}\right),$$

$$\hat{L}_2 = -i\left(\sin\alpha\cot\beta\frac{\partial}{\partial\alpha} - \cos\alpha\frac{\partial}{\partial\beta} - \frac{\sin\alpha}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\gamma}\right),$$

$$\hat{L}_3 = i\frac{\partial}{\partial\alpha}, \qquad \hat{L}_{3'} = i\frac{\partial}{\partial\gamma}.$$

Операторы $\hat{L}^2, \hat{L}_3, \hat{L}_{3'}$ взаимно коммутируют и их собственная функция есть один из основных объектов квантовой теории углового момента – $D^L_{mm'}(\alpha,\beta,\gamma)$ -функция Вигнера [14]. Исходя из этого в координатах (13) схеме разделения переменных в уравнении Шредингера для 5-мерной задачи Кулона соответствует следующая факторизация:

$$\psi(r,\theta,\alpha,\beta,\gamma) = R(r)\,Z(\theta)\,D^L_{mm'}(\alpha,\beta,\gamma).$$

Теперь, подставляя (14) в уравнение Шредингера (9), записанное в гиперсферических координатах (13), и учитывая, что

$$\hat{J}^2\,D^L_{mm'}(\alpha,\beta,\gamma) = J(J+1)\,D^L_{mm'}(\alpha,\beta,\gamma),$$

приходим к следующему, нормированному на единицу, сферическому базису 5-мерной задачи Кулона:

$$\psi_{n\lambda L mm'}(r,\theta,\alpha,\beta,\gamma) = \sqrt{\frac{2L+1}{2\pi^2}}\,R_{n\lambda}(r)\,Z_{\lambda L}(\theta)\,D^L_{mm'}(\alpha,\beta,\gamma), \qquad (14)$$

где

$$Z_{\lambda L}(\theta) = 2^{2L+1}\Gamma\left(2L+\frac{3}{2}\right)\sqrt{\frac{(2\lambda+3)(\lambda-2L)!}{2\pi(\lambda+2L+2)!}}(\sin\theta)^{2L}\,C^{2L+3/2}_{\lambda-2L}(\cos\theta),$$

$$R_{n\lambda}(r) = \frac{4}{(n+2)^3}\sqrt{\frac{(n+\lambda+3)!}{a^5(n-\lambda)!}}\,\frac{(2\kappa r)^\lambda}{(2\lambda+3)!}\,e^{-\kappa r}\,F(-n+\lambda;2\lambda+4;2\kappa r).$$

Здесь C^λ_n – полином Гегенбауэра, $\kappa = \sqrt{-2\mu_0\varepsilon/\hbar^2} = 1/a(n+2)$, $a = \hbar^2/\mu_0 e^2$ – радиус Бора, а квантовые числа λ и n принимают значения $\lambda = 2L, 2L+2, \ldots, n;\ \ n = \lambda, \lambda+1, \ldots$

В $R^5(x_i)$ определим 5-мерные параболические координаты следующим образом:

$$x_0 = \frac{1}{2}(\mu-\nu),\ \ x_2 + ix_1 = \sqrt{\mu\nu}\sin\frac{\beta}{2}e^{i\frac{\alpha-\gamma}{2}},\ \ x_4 + ix_3 = \sqrt{\mu\nu}\cos\frac{\beta}{2}e^{i\frac{\alpha+\gamma}{2}}, \quad (15)$$

где $\mu,\nu \in [0,\infty)$. В координатах (15) оператор Лапласа имеет вид

$$\Delta_5 = \frac{4}{\mu+\nu}\left[\frac{1}{\mu}\frac{\partial}{\partial\mu}\left(\mu^2\frac{\partial}{\partial\mu}\right) + \frac{1}{\nu}\frac{\partial}{\partial\nu}\left(\nu^2\frac{\partial}{\partial\nu}\right)\right] - \frac{4}{\mu\nu}\hat{L}^2.$$

Исходя из произведения

$$\psi(\mu,\nu,\alpha,\beta,\gamma)=e^{-\kappa(\mu+\nu)/2}(\mu\nu)^{L} f_1(\mu) f_2(\nu) D_{mm'}^{L}(\alpha,\beta,\gamma),$$

для функций f_1 и f_2 получим уравнение вырожденной гипергеометрической функции

$$y_1\frac{d^2 f_1}{dy_1^2}+(2L+2-y_1)\frac{df_1}{dy_1}-\left(L+1-\frac{\sqrt{\mu_0}}{2\kappa\hbar}\beta-\frac{\mu_0 e^2}{2\kappa\hbar^2}\right)f_1=0,$$

$$y_2\frac{d^2 f_2}{dy_2^2}+(2L+2-y_2)\frac{df_2}{dy_2}-\left(L+1+\frac{\sqrt{\mu_0}}{2\kappa\hbar}\beta-\frac{\mu_0 e^2}{2\kappa\hbar^2}\right)f_2=0,$$

где $y_1=\kappa\mu$, $y_2=\kappa\nu$, а β – параболическая постоянная разделения. Нас интересуют связанные состояния, и поэтому вырожденные гипергеометрические функции обрываются, т.е.

$$n_1=-L-1+\frac{\sqrt{\mu_0}}{2\kappa\hbar}\beta+\frac{\mu_0 e^2}{2\kappa\hbar^2},\qquad n_2=-L-1-\frac{\sqrt{\mu_0}}{2\kappa\hbar}\beta+\frac{\mu_0 e^2}{2\kappa\hbar^2},$$

где n_1 и n_2 – целые неотрицательные числа. Теперь, учитывая (12), из последних соотношений получим, что параболические квантовые числа n_1 и n_2 связаны с главным квантовым числом n следующим образом: $n=n_1+n_2+2L$. Нормированный на единицу параболический базис имеет вид

$$\psi_{n_1 n_2 L m m'}(\mu,\nu,\alpha,\beta,\gamma)=\frac{1}{(n+2)^2}\sqrt{\frac{2L+1}{\pi^2 a^5}}\,\Phi_{n_1 L}(\mu)\Phi_{n_2 L}(\nu)D_{mm'}^{L}(\alpha,\beta,\gamma), \quad (16)$$

где

$$\Phi_{pq}(x)=\sqrt{\frac{(p+2q+1)!}{p!}}\,\frac{(\kappa x)^q}{(2q+1)!}e^{-\kappa x/2}\,F(-p;2q+2;\kappa x).$$

4. Обобщенное разложение Парка–Тартера

Теперь, при фиксированном значении энергии, мы можем параболические связанные состояния (16) записать как когерентную квантовую смесь гиперсферических связанных состояний (14):

$$\psi_{n_1 n_2 L m m'}(\mu,\nu,\alpha,\beta,\gamma)=\sum_{\lambda=2L}^{n}W_{n_1 n_2 L}^{\lambda}\,\psi_{n\lambda L m m'}(r,\theta,\alpha,\beta,\gamma). \quad (17)$$

Разложение (17) обобщает на 5-мерный случай разложение Парка–Тартера [4,5] из теории атома водорода.

Цель этого параграфа заключается в нахождении точного выражения для амплитуд $W^{\lambda}_{n_1n_2L}$. Вначале заметим, что гиперсферические и параболические координаты связаны между собой соотношениями $\mu = r(1+\cos\theta)$, $\nu = r(1-\cos\theta)$. Потом, подставляя $\theta = 0$, учитывая, что

$$C_n^{\nu}(1) = \frac{\Gamma(n+2\nu)}{n!\Gamma(2\nu)},$$

и пользуясь условием ортогональности радиальных волновых функций по гипермоменту [15]

$$\int_0^{\infty} r^2 R_{n\lambda'}(r) R_{n\lambda}(r)\, dr = \frac{2}{a^2(n+2)^3}\frac{\delta_{\lambda\lambda'}}{2\lambda+3},$$

приходим к следующему интегральному представлению для обобщенных амплитуд Парка-Тартера:

$$W^{\lambda}_{n_1n_2L} = \frac{K^{nn_1}_{\lambda L}}{(2L+1)!(2\lambda+3)!}\left[\frac{(2\lambda+3)(\lambda-2L)!(n+\lambda+3)!(n_1+2L+1)!(n_2+2L+1)!}{(n_1)!(n_2)!(n-\lambda)!(\lambda+2L+2)!}\right]^{1/2}.$$

Здесь

$$K^{nn_1}_{\lambda L} = \int_0^{\infty} e^{-x} x^{\lambda+2L+2} F(-n_1; 2L+2; x) F(-n+\lambda; 2\lambda+4; x)\, dx,$$

где $x = 2\kappa r$. Интеграл легко вычисляется и для коэффициентов $W^{\lambda}_{n_1n_2L}$ получим

$$W^{\lambda}_{n_1n_2L} = \frac{(n-2L)!}{(2L+1)!}\left[\frac{(2\lambda+3)(\lambda+2L+2)!(n_1+2L+1)!(n_2+2L+1)!}{(n_1)!(n_2)!(\lambda-2L)!(n-\lambda)!(n+\lambda+3)!}\right]^{1/2} \times$$

$$\times\, {}_3F_2\left\{\begin{matrix}-n_1, -\lambda+2L, \lambda+2L+3\\ 2L+2, -n+2L\end{matrix}\middle|\, 1\right\}.$$

Коэффициенты $W^{\lambda}_{n_1n_2L}$ могут быть выражены через коэффициенты Клебша-Гордана. В самом деле, известно [14], что коэффициенты $C^{c\gamma}_{a\alpha;b\beta}$ Клебша-Гордана группы $SU(2)$ выражаются через обобщенную гипергеометрическую функцию ${}_3F_2$ следующим образом:

$$C^{c\gamma}_{a\alpha;b\beta} = (-1)^{a-\alpha}\delta_{\gamma,\alpha+\beta}\left[\frac{(2c+1)(b-a+c)!(a+\alpha)!(b+\beta)!(c+\gamma)!}{(a-\alpha)!(b-\beta)!(c-\gamma)!(a+b-c)!(a-b+c)!(a+b+c+1)!}\right]^{1/2} \times$$

$$\times \frac{(a+b-\gamma)!}{(b-a+\gamma)!}\, {}_3F_2\left\{\begin{matrix}-a+\alpha, c+\gamma+1, -c+\gamma\\ \gamma-a-b, b-a+\gamma+1\end{matrix}\middle|\, 1\right\}.$$

Сравнивая последние две формулы, имеем

$$W^{\lambda}_{n_1n_2L} = (-1)^{n_1} C^{\lambda+1, 2L+1}_{\frac{n+1}{2}, \frac{2L+n_2-n_1+1}{2}; \frac{n+1}{2}, \frac{2L+n_1-n_2+1}{2}}.$$

6. Заключение

Выше была построена теория связанных состояний заряженной квантовой частицы, движущейся в кулоновском поле, в R^5. Эта задача, с физической точки зрения, была спровоцирована дион-осцилляторной дуальностью, присущей математической структуре квантовой механики и доказывающей, что в ее рамках есть место неабелевым магнитным монополям. Свойство дион-осцилляторной дуальности присуще не только отображению $R^8 \to R^5$, но и отображениям $R^1 \to R^1$, $R^2 \to R^2$ и $R^4 \to R^3$, причем в первых двух случаях на выходе возникают одномерный и двумерный анион, а в третьем – абелев монополь Дирака [9]. Отображение $R^4 \to R^3$ связывает квантополевую модель Φ^4 с квантовомеханической задачей об эффекте Штарка. Тем самым устанавливается мост между квантовополевыми и квантовомеханическими методами. Далее, дион-осцилляторная дуальность позволяет выявить многие связи между группами симметрий осциллятора и кулоновского поля. В частности, результат настоящей статьи позволяет обобщить задачу и вывести группу скрытой симметрии монополя Янга [8].

Данная работа выполнена при поддержке гранта ANSEF № PS124-01.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц**. Квантовая механика. М., Наука, 1974.
2. **Г.Бете, Э.Солпитер**. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. М., Физматгиз, 1960.
3. **Н.Ф.Мотт, Г.Месси**. Теория атомных столкновений. М., ИЛ, 1951.
4. **C.B.Tarter**. J. Math. Phys., **11**, 3192 (1970).
5. **D.Park**. Z. Phys., **159**, 155 (1960).
6. **L.G.Mardoyan, A.N.Sissakian, V.M.Ter-Antonyan**. Phys. Atom. Nucl., **61**, 1859 (1998).
7. **L.G.Mardoyan, A.N.Sissakian, V.M.Ter-Antonyan**. Mod. Phys. Lett., **A14**, 1303 (1999).
8. **C.N.Yang**. J. Math. Phys., **19**, 320 (1978).
9. **V.M.Ter-Antonyan**. Dyon-oscillator duality. Proc. of the Int. School "Symmetries and integrable systems". Dubna, Russia, June 8-11, 1999.
10. **Т.Ченг, Л.Ли**. Калибровочные теории в физике элементарных частиц. М., Наука, 1987.
11. **J.A.Harvey**. Magnetic monopoles, duality and supersymmetry. EFI-96-06, hep-th/960386.
12. **L.S.Davtyan, L.G.Mardoyan, G.S.Pogosyan, A.N.Sissakian, V.M.Ter-Antonyan**. J. Phys., **A20**, 6121 (1987).
13. **С.П.Аллилуев**. ЖЭТФ, **33**, 200 (1957).
14. **Д.А.Варшалович, А.Н.Москалев, В.К.Херсонский**. Квантовая теория углового момента. Л., Наука, 1975.
15. **Л.Г.Мардоян, Г.С.Погосян, В.М.Тер-Антонян**. Изв. АН Арм. ССР, Физика, **19**, 3 (1984).

ԿՈՒԼՈՆ-ՕՍՑԻԼՅԱՏՈՐԱՅԻՆ ԴՈՒԱԼՈՒԹՅՈՒՆԸ ԵՎ 5-ՉԱՓԱՆԻ ԿՈՒԼՈՆԻ ԽՆԴԻՐԸ

Խ.Հ. ԿԱՐԱՅԱՆ, Լ.Գ. ՄԱՐԴՈՅԱՆ, Վ.Մ. ՏԵՐ-ԱՆՏՈՆՅԱՆ

Ցույց է տրված, որ Հուրվիցի ձևափոխությունը ութ չափանի օսցիլյատորի խնդիրը կապում է հինգ չափանի Կուլոնի խնդրի հետ: Տրված է հինգ չափանի Կուլոնի խնդրի վերլուծությունը հիպերսֆերիկ և պարաբոլիկ կոորդինատներում: Հաշվված են այդ համակարգի սֆերիկ և պարաբոլիկ բազիսները, ստացված են Փարկի և Թարթերի ներկայացումները սֆերա-պարաբոլիկ և պարաբոլա-սֆերիկ միջբազիսային վերլուծությունների գործակիցների համար:

COULOMB-OSCILLATOR DUALITY AND 5-DIMENSIONAL COULOMB PROBLEM

KH.H. KARAYAN, L.G. MARDOYAN, V.M. TER-ANTONYAN

It is shown that the Hurwitz transformation connects the eight-dimensional oscillator problem with the five-dimensional Coulomb problem. The hyperspherical and parabolic coordinates are applied for analyzing the five-dimensional Coulomb problem. We calculate the spherical and parabolic bases for this system, derive the Park's and Tarter's representations for the coefficients of the spherical-parabolic and parabolic-spherical interbasis expansions.

Известия НАН Армении, Физика, т.38, №2, с.87-96 (2003)

УДК 621.315.592

ЭЛЕКТРОННЫЕ И ПРИМЕСНЫЕ СОСТОЯНИЯ В СФЕРИЧЕСКОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ С ПОКРЫТИЕМ

А.Х. МАНАСЕЛЯН, А.А. КИРАКОСЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 7 августа 2002 г.)

В рамках метода эффективной массы исследованы электронные состояния в сферической квантовой точке, состоящей из полупроводниковой сферы с покрытием с учетом различия эффективной массы носителей заряда в сфере и в покрытии, как при отсутствии, так и при наличии водородоподобной примеси в центре квантовой точки. Рассмотрено влияние разности диэлектрических постоянных сферы, покрытия и окружающей среды на примесные состояния. Численные оценки проведены для системы $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs - AlAs$ (или вакуум) при различных значениях радиусов сферы, покрытия и концентрации сплава *x*.

1. Введение

Низкоразмерные электронные системы, в которых реализуется квантовый режим поведения носителей заряда (НЗ), весьма чувствительны к изменениям размеров, геометрической формы и состава [1]. Для понимания происходящих в низкоразмерных полупроводниковых гетероструктурах физических процессов и для конкретных расчетов характеристик таких систем необходимо адекватное описание электронных и донорных (акцепторных) состояний при наличии в системе примесных центров. Ввиду огромных возможностей прикладных применений низкоразмерных полупроводниковых систем, а также с точки зрения фундаментальной науки, исследования примесных состояний в них проводятся весьма интенсивно [2,3].

В настоящее время, благодаря значительным успехам в области техники роста кристаллов, стало возможным создание и исследование низкоразмерных многослойных полупроводниковых систем. Так, в [3-10] исследованы спектры поглощения и флуоресценции квантовоточечных квантовых ям, в [11-15] рассмотрены электронные и примесные состояния в многослойных квантовых проволоках (КП) и квантовых точках (КТ). В работах [5,8,11,16] определение волновых функций и примесных состояний проведено в рамках метода эффективной массы с помощью точного решения уравнения Шредингера.

Следует отметить, что в большинстве работ, посвященных расчету энергии связи в низкоразмерных гетероструктурах, пренебрегается различием диэлектрических постоянных (ДП) составляющих систему компонент или системы и окружающей среды. Отчасти это обусловлено тем, что, как правило, рассматриваются гетероструктуры из GaAs и $Ga_{1-x}Al_xAs$ при значениях $x \le 0.4$. Однако даже для данной пары разность между ДП увеличивается с ростом x, достигая при $x = 1$ значения, составляющего почти 24% ДП GaAs [17].

Влияние диэлектрической неоднородности на энергию связи НЗ в размерно квантованных пленках исследовано в [18-21], а в квантовых проволоках – в [15,22-24]. Полученные результаты свидетельствуют, что с уменьшением как размерности, так и характерных размеров системы пренебрежение диэлектрической неоднородностью системы приводит к значительным ошибкам.

В данной работе в рамках метода эффективной массы рассмотрены электронные и примесные донорные состояния в полупроводниковой сфере, покрытой сферическим слоем из другого полупроводника и помещенной в диэлектрическую среду (или вакуум), с учетом различия как эффективной массы НЗ в сфере и в покрытии, так и диэлектрических постоянных сферы, покрытия и окружающей среды. С помощью точного решения уравнения Шредингера найдены уровни энергии и волновые функции электрона в поле водородоподобной примеси, помещенной в центре квантовой точки.

2. Спектр энергии и состояния электрона в сфере с покрытием

Рассмотрим состояния электрона в сферически симметричной потенциальной яме

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r < R_1\,, \\ V_0, & R_1 \le r \le R_2\,, \\ \infty, & r > R_2\,. \end{cases} \tag{1}$$

Эффективная масса электрона принимает различные значения в сфере и в области покрытия:

$$m(r) = \begin{cases} m_1, & r < R_1\,, \\ m_2, & R_1 \le r \le R_2\,. \end{cases} \tag{2}$$

Вследствие сферической симметрии КТ решения уравнения Шредингера можно представить в виде произведения сферической функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ и радиальной функции $g_{nl}(r)$, которая удовлетворяет уравнению

$$\frac{d^2 g_{nl}}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dg_{nl}}{dr} + \left\{\frac{2m(r)}{\hbar^2}\left[E - V(r)\right] - \frac{l(l+1)}{r^2}\right\} g_{nl} = 0\,. \tag{3}$$

Удобно перейти к безразмерным величинам, используя эффективный боровский радиус $a_B = \hbar^2 \chi_1 / m_1 e^2$ и эффективную ридберговскую энергию $E_R = m_1 e^4 / 2\hbar^2 \chi_1^2$.

1. В области сферы $(0 \le r \le R_1)$ для радиальной функции получаем

$$\frac{d^2 g_1}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{dg_1}{dx} + \left[\alpha^2 - \frac{l(l+1)}{x^2}\right] g_1 = 0\,, \tag{4}$$

где

$$\alpha^2 = \frac{E}{E_R}\,. \tag{5}$$

Решение (4), удовлетворяющее условию конечности в центре сферы $r = 0$, имеет вид

$$g_1(x) = C_1 x^{-1/2} J_{l+1/2}(\alpha x)\,, \tag{6}$$

где C_1 – постоянная нормировки, $J_{l+1/2}$ – функция Бесселя первого рода.

2. В области покрытия $(R_1 \le r \le R_2)$ для радиальной функции получим

$$\frac{d^2 g_2}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{dg_2}{dx} - \left[\beta^2 + \frac{l(l+1)}{x^2}\right] g_2 = 0\,, \tag{7}$$

где

$$\beta^2 = \frac{m_2}{m_1}\frac{V_0 - E}{E_R}\,. \tag{8}$$

На границе покрытия с окружающей средой $(r = R_2)$ потенциал бесконечен, поэтому решение (7) на границе должно обращаться в нуль. Удовлетворяющее этому условию решение уравнения (7) имеет вид

$$g_2(x) = C_2 x^{-1/2}\left[I_{l+1/2}(\beta x) - \frac{I_{l+1/2}(\beta x_2)}{K_{l+1/2}(\beta x_2)} K_{l+1/2}(\beta x)\right], \tag{9}$$

где C_2 – постоянная нормировки, а $I_{l+1/2}$ и $K_{l+1/2}$ – модифицированные сферические функции Бесселя, соответственно, первого и третьего рода, порядка $l + 1/2$.

Уровни энергии электрона определяются из условия непрерывности логарифмической производной волновой функции при $r = R_1$. Для состояний с $l = 0$ (s-состояния) оно имеет следующий вид:

$$\frac{m_1}{m_2}\frac{\beta}{\alpha}\frac{J_{1/2}(\alpha x_1)}{J_{3/2}(\alpha x_1)} = \frac{I_{1/2}(\beta x_2)K_{1/2}(\beta x_1) - K_{1/2}(\beta x_2)I_{1/2}(\beta x_1)}{I_{1/2}(\beta x_2)K_{3/2}(\beta x_1) + K_{1/2}(\beta x_2)I_{3/2}(\beta x_1)}\,. \tag{10}$$

В случае отсутствия покрытия $(R_1 = R_2)$ из (10) следует, что

$J_{1/2}(\alpha x_1)=0$, откуда получаем спектр энергии электрона в сферической яме [25].

3. Потенциал примесного центра

Рассмотрим КТ, состоящую из полупроводниковой сферы радиуса R_1 с диэлектрической постоянной χ_1 и покрытия с радиусом R_2 и диэлектрической постоянной χ_2, в среде с диэлектрической постоянной χ_3.

Решая уравнение Пуассона в области сферы, покрытия и окружающей среды, и воспользовавшись граничными условиями на поверхности "сфера–покрытие" $(r=R_1)$ и "покрытие – окружающая среда" $(r=R_2)$, получим выражение для потенциальной энергии электрона в поле находящейся в центре КТ примеси в диэлектрически неоднородной системе:

$$U(r)=\begin{cases} -\dfrac{e^2}{\chi_1 r}+\dfrac{e^2}{\chi_1 R_1}\left(1-\dfrac{\chi_1}{\chi_2}\right)+\dfrac{e^2}{\chi_2 R_2}\left(1-\dfrac{\chi_2}{\chi_3}\right), & r<R_1, \\ -\dfrac{e^2}{\chi_2 r}+\dfrac{e^2}{\chi_2 R_2}\left(1-\dfrac{\chi_2}{\chi_3}\right), & R_1\le r\le R_2, \\ -\dfrac{e^2}{\chi_3 r}, & r>R_2. \end{cases} \quad (11)$$

При $\chi_1=\chi_2=\chi$ из (11) следует выражение для потенциальной энергии электрона в поле кулоновского центра в диэлектрически однородной среде: $U(r)=-e^2/\chi_1 r$. Слагаемые, пропорциональные $(1-\chi_1/\chi_2)$ и $(1-\chi_2/\chi_3)$, учитывают различие ДП покрывающего слоя и окружающей среды. Следует заметить, что наибольшее изменение $U(r)$ претерпевает при $\chi_3=1$, т.е. когда КТ находится в вакууме.

4. Примесные состояния в КТ

Рассмотрим состояния электрона в потенциальной яме, представляющей собой наложение потенциальных энергий (1) и (11) (рис.1).

1. В области сферы $(r\le R_1)$ для радиальной части волновой функции электрона с учетом (1) и (11) получаем:

$$\frac{d^2 f}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{df}{dr}+\left[\frac{2m_1}{\hbar^2}\left(E_1+\frac{e^2}{\chi_1 r}\right)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]f=0, \quad (12)$$

где

$$E_1=E+\frac{e^2}{\chi_1 R_1}\left(\frac{\chi_1}{\chi_2}-1\right)+\frac{e^2}{\chi_2 R_2}\left(\frac{\chi_2}{\chi_3}-1\right). \quad (13)$$

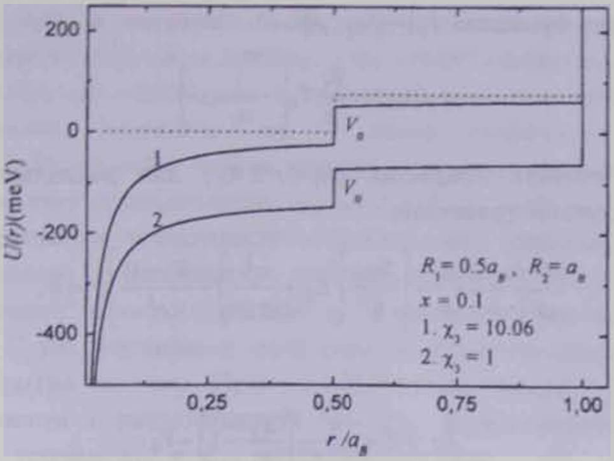

Рис.1 Зависимость потенциальной энергии электрона от расстояния в квантовой точке: 1 – квантовая точка находится в AlAs, 2 – квантовая точка находится в вакууме (пунктиром показана потенциальная энергия в отсутствие примесного центра).

В рассматриваемой системе возможны связанные состояния как с отрицательной, так и с положительной энергиями, поэтому рассмотрим два случая.

1а. Отрицательные энергии: $E_1 < 0$. Обозначим через $\alpha_1^2 = -E_1/E_R > 0$ и введем функцию $W(z) = zf(z)$ $(z = 2\alpha_1\, r/a_B)$, для которой получаем уравнение

$$\frac{d^2W}{dz^2} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{1}{\alpha_1 z} - \frac{l(l+1)}{z^2}\right]W = 0\,, \tag{14}$$

решениями которого являются функции Уиттекера [26]. Удовлетворяющее условию конечности в точке $z = 0$ $(r = 0)$ решение имеет вид

$$f_1(z) = B_1 e^{-z/2} z^l F\left(1 + l - \frac{1}{\alpha_1}, 2l + 2; z\right), \tag{15}$$

где $F(a, b; t)$ – вырожденная гипергеометрическая функция [26].

1б. Положительные энергии: $E_1 > 0$. Обозначим через $\alpha_1^2 = E_1/E_R > 0$ и введем функцию $W(\rho) = \rho f(\rho)$ $(\rho = \alpha_1 x = \alpha_1\, r/a_B)$, для которой получаем уравнение

$$\frac{d^2W}{d\rho^2} + \left[1 + \frac{2}{\alpha_1 \rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]W = 0\,, \tag{16}$$

два линейно независимых решения которого выражаются через волновые функции Кулона $F_l(-1/\alpha_1, \rho)$ и $G_l(-1/\alpha_1, \rho)$ [27]. Ввиду сингулярности $G_l(-1/\alpha_1, \rho)$ в точке $\rho = 0$ $(r = 0)$, конечное в сфере решение (12) выражается через функцию $F_l(-1/\alpha_1, \rho)$:

$$f_1(\rho) = \frac{B_1}{\rho} F_l\left(-\frac{1}{\alpha_1}, \rho\right). \tag{17}$$

2. В области покрытия $(R_1 \le r \le R_2)$ для радиальной волновой функции получаем уравнение

$$\frac{d^2 f}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{df}{dr} + \left[\frac{2m_2}{\hbar^2}\left(E_2 + \frac{e^2}{\chi_2 r}\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] f = 0, \tag{18}$$

где

$$E_2 = E + \frac{e^2}{\chi_2 R_2}\left(\frac{\chi_2}{\chi_3} - 1\right) - V_0. \tag{19}$$

2а. Отрицательные энергии: $E_2 < 0$. (18) можно привести к уравнению Уиттекера (14) с заменой α_1^{-1} на $\lambda_1 = (m_2\chi_1/m_1\chi_2)\beta_1$, где $\beta_1^2 = m_2|E_2|/m_1 E_R$. Решение (18), удовлетворяющее условию $f_2(r = R_2) = 0$, имеет вид:

$$f_2(x) = B_2 e^{-\beta x}(2\beta_1 x)^l \Bigg[\big[F(l+1-\lambda_1, 2l+2; 2\beta_1 x) - \\ - \frac{F(l+1-\lambda_1, 2l+2; 2\beta_1 x_2)}{U(l+1-\lambda_1, 2l+2; 2\beta_1 x_2)} U(l+1-\lambda_1, 2l+2; 2\beta_1 x)\Bigg], \tag{20}$$

где $U(a,b;t)$ – второе решение уравнения для вырожденной гипергеометрической функции [26].

2б. Положительные энергии: $E_2 > 0$. В этом случае (18) приводится к уравнению для волновых функций Кулона с заменой α_1^{-1} на $\lambda_1 = m_1\chi_2\beta_1 / m_2\chi_1$, где $\beta_1^2 = m_2 E_2/m_1 E_R$. Удовлетворяющее условию $f_2(r = R_2) = 0$ решение (18) имеет вид:

$$f_2(x) = \frac{c_2}{x}\left[F_l\left(-\frac{1}{\lambda}, \beta_1 x\right) - \frac{F_l\left(-\frac{1}{\lambda}, \beta_1 x_2\right)}{G_l\left(-\frac{1}{\lambda}, \beta_1 x_2\right)} G_l\left(-\frac{1}{\lambda}, \beta_1 x\right)\right], \tag{21}$$

где $G_l(-1/\lambda, \beta_1 x)$ – иррегулярная волновая функция Кулона [27]. Уровни энергии примесных состояний определяются из условия непрерывности логарифмической производной на границе сферы и покрытия: $r = R_1$.

5. Обсуждение результатов

Численные расчеты проведены для КТ, состоящей из сферы GaAs, покрытого слоем из $Ga_{1-x}Al_xAs$, находящейся в диэлектрической среде AlAs или в вакууме. Были использованы следующие значения параметров [17]: $m_1 = 0.067m_0$, $m_2 = (0.067 + 0.083x)m_0$, $\chi_1 = 13.18$, $\chi_2 = 13.18 - 3.12x$, $\chi_3 = 10.06$ или 1, при изменении концентрации сплава в пределах $0 \le x \le 0.4$, m_0 – масса свободного электрона, $V_0 = 1.247xQ_e$ (эВ), $Q_e = 0.6$ – доля разрыва потенциальной энергии, приходящаяся на зону проводимости, $E_R = 5.2$ мэВ, $a_B = 104$ Å.

Исследование зависимости энергетических уровней E_{n0} от концентрации сплава x показывает, что для значений $x \ge x_1 = 0.0571$ уровень E_{10} "входит" в яму и с ростом x "поднимается" из-за роста высоты барьера. С увеличением x этот рост замедляется ввиду того, что в области покрытия $m_2 > m_1$. При $x \ge 0.2830$ в яму "входит" уровень E_{20}, который с ростом x растет быстрее, чем E_{10}. В рассматриваемой области $0 \le x \le 0.4$ уровни E_{30} и E_{40} находятся вне ямы.

Согласно [15], в случае КП с покрытием при той же толщине проволоки и покрывающего слоя ($R_1 = 0.75a_B$, $R_2 = 1.5a_B$) первый уровень "входит" в яму при меньшем, чем x_1, значении. Этот факт указывает на усиление роли размерного квантования в случае шара, поскольку первый уровень в сферической яме появляется при большей, чем в проволоке, глубине ямы.

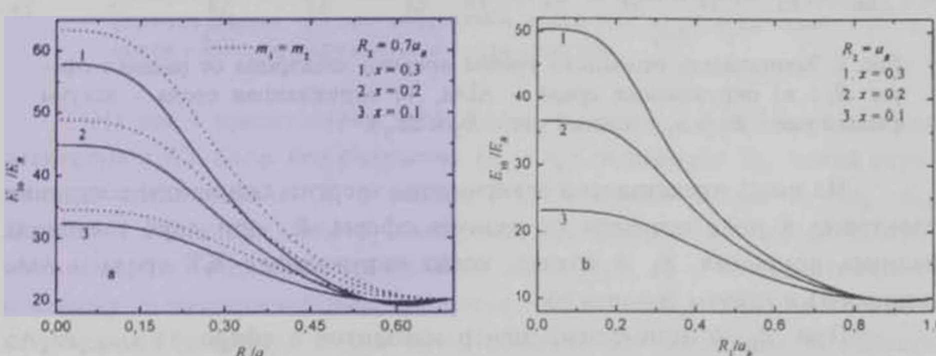

Рис.2. Зависимость энергии основного состояния электрона от радиуса сферы R_1 при различных значениях радиуса покрытия: а) $R_2 = 0.7a_B$, б) $R_2 = a_B$. Пунктирная кривая соответствует модельному расчету при $m_1 = m_2$.

На рис.2 представлена зависимость энергии основного состояния электрона от радиуса шара R_1 в КТ при отсутствии примесного центра для различных фиксированных значений радиуса покрывающего слоя и концентрации x Al.

При $R_1 = 0$ уровень E_{10} совпадает с энергией основного состояния в сфере из $Ga_{1-x}Al_xAs$ с радиусом $R_2 = 0.7a_B$. С увеличением радиуса сферы уровень энергии опускается все ниже и при $R_1 = R_2$ совпадает с основным уровнем в сфере из GaAs с непроницаемыми стенками $E_1 \approx 20.14E_R \approx 104.74$ мэВ. При стремлении R_1 к R_2 уровни энергии проходят через минимум, что является результатом конкуренции двух факторов: увеличения ширины квантовой ямы из GaAs, приводящего к понижению уровней, и увеличения массы в области покрытия (барьера), приводящего к их повышению. Модельный расчет в предположении $m_1 = m_2$ обнаруживает отсутствие немонотонных участков на кривых $E_{n0}(R_1)$.

С увеличением радиуса покрытия R_2 уровни энергии понижаются, т.к. вследствие туннелирования в область барьера увеличивается область локализации электрона. При $R_2 = 1.3a_B$ значение $E_{10}(R_2)$ практически совпадает с асимптотическим значением $E_{10}(R_2 \to \infty)$.

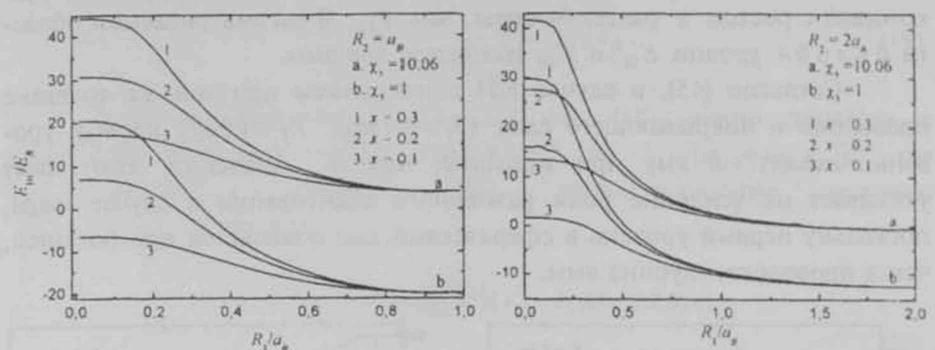

Рис.3. Зависимость основного уровня энергии электрона от радиуса сферы R_1: a) окружающая среда – AlAs, b) окружающая среда – вакуум (левый рис.: $R_2 = a_B$, правый рис.: $R_2 = 2a_B$).

На рис.3 представлена зависимость энергии основного состояния электрона в поле примеси от радиуса сферы R_1 при двух значениях радиуса покрытия R_2 в случае, когда окружающая КТ среда – AlAs (кривая a) и вакуум (кривая b).

При $R_1 = 0$ примесный центр находится в сфере из $Ga_{1-x}Al_xAs$ радиуса $R_2 = a_B$, при этом энергия основного состояния уменьшается приблизительно в 2,25 раза при замене окружения AlAs на вакуум. Этот факт четко указывает на усиление кулоновского взаимодействия электрона с примесным центром, что осуществляется в основном через вакуум. При значении $R_2 = 2a_B$ (рис.3, правый) энергия основного состояния (при $R_1 = 0$) уменьшается почти 1.4 раза при замене AlAs на вакуум. Это указывает на ослабление роли кулоновского взаимодействия с увеличением радиуса покрытия R_2. С уменьшением концентрации x уменьшаются и высота барьера V_0, и диэлектрическая неоднородность КТ, что приводит к опусканию основного примесного уровня с увеличением радиуса сферы R_1. Такое поведение энергии основного состояния приводит к зависимости энергии связи примесного центра E_b от R_1, подтверждающей ослабление взаимодействия электрона с примесным центром при замене AlAs на вакуум.

Интересно сравнить роль диэлектрической неоднородности в случае КП [15] и КТ. Согласно оценкам, при равных значениях радиусов проволоки и сферы $R_1 = 0.5a_B$ (радиус покрытия $R_2 = a_B$), отношение энергий связи в проволоке и в сфере $E_b^{wire} / E_b^{sphere} = 0.532$ для $x = 0.3$ и $\chi_3 = 10.06$ (AlAs), и $E_b^{wire} / E_b^{sphere} = 0.495$ для $x = 0.3$ и $\chi_3 = 1$ (вакуум), что свидетельствует об усилении влияния различия ДП с уменьшением размерности наноструктуры.

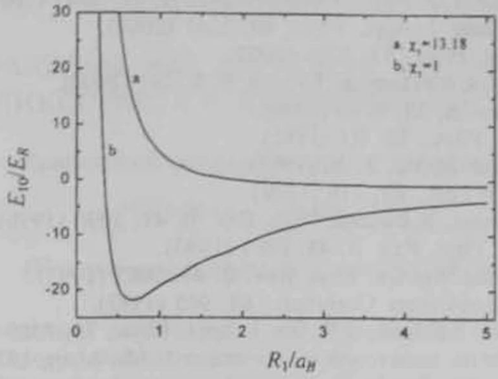

Рис.4. Зависимость энергии основного уровня электрона от радиуса сферы R_1 при отсутствии покрытия: a) окружающая среда – AlAs, b) окружающая среда – вакуум.

На рис.4 представлена зависимость энергии основного состояния электрона в КТ GaAs без покрытия $(R_2 = R_1)$ от радиуса R_1, когда окружающая среда – GaAs (a) и вакуум (b). На кривой a при $R_1 < a_B$ E_{10} возрастает с уменьшением R_1 ввиду наличия бесконечно высокого ограничивающего потенциала на границе шара. При $R_1 \to \infty$ E_{10} стремится к своему асимптотическому значению $E_{10}(\infty) = -E_R$. Кривая b, соответствующая вакууму, имеет ярко выраженный минимум в области $R_{1\min} = 0.75a_B$ и затем стремительно возрастает с уменьшением R_1, что обусловлено усилением роли размерного квантования. При увеличении R_1 $E_{10}(R_1)$ монотонно возрастает, стремясь к значению $E_{10}(\infty) = -E_R$ при $R_1 \to \infty$ (сфера из GaAs в вакууме).

Работа выполнена при поддержке грантов INTAS 99-00928, INTAS 2001-175 и ANSEF PS 24-01.

ЛИТЕРАТУРА

1. **P.Harrison**. Quantum wells, wires, and dots. Theoretical and computational physics. John Wiley & Sons ltd, New York, 1999.
2. **G.Bastard**. Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures. Les e'ditions de Physique. Les Ulis, Cedex, France, 1988.
3. **D.K.Ferry** and **S.M.Goodnick**. Transport in Nanostructures. Cambridge, U.K., Cambridge University Press, 1997.
4. **G.Weber, P.A.Schulz,** and **L.E.Oliveira**. Phys. Rev. B, **38,** 2179 (1988).

5. **N.Porras-Montenegro, S.T.Peres-Merchancano, A.Latge**. J. Appl. Phys., **74**, 7624 (1993).
6. **D.Schooss, A.Mews, A.Eychmuler**, and **H.Weller**. Phys. Rev. B, **49**, 17072 (1994).
7. **A.Eychmuler, A.Mews, H.Weller**. Chem. Phys. Lett., **208**, 59 (1993).
8. **A.Mews, A.Eychmuler, M.Giersig, D.Schooss**, and **H.Weller**. J. Phys. Chem., **98**, 934 (1994).
9. **A.Mews, A.V.Kadavaich, U.Banin**, and **A.P.Aliviastos**. Phys. Rev. B, **53**, R13242 (1996).
10. **Н.В.Ткач, И.В.Пронишин, А.М.Маханец**. ФТТ, **40**, 557 (1998).
11. **C.Y.Hsieh**. Chin. J. Phys. (Taipei), **38**, 478 (2000).
12. **C.Y.Hsieh, D.S.Chuu**. J. Phys.: Condens. Matter, **12**, 8641 (2000).
13. **C.Y.Hsieh, D.S.Chuu**. J. Appl. Phys., **89**, 2241 (2001).
14. **C.Y.Hsieh**. J. Appl. Phys., **91**, 2326 (2002).
15. **M.M.Aghasyan, A.A.Kirakosyan**. Physica E, **8**, 281 (2000).
16. **J.L.Zhu**. Phys. Rev. B, **39**, 8780 (1989).
17. **S.Adachi**. J. Appl. Phys., **58**, R1 (1985).
18. **N.S.Rytova**. Vestnik MGU, **3**, 30 (1967).
19. **L.V.Keldysh**. JETP Lett., **29**, 716 (1979).
20. **S.Fraizzoli, F.Bassani, R.Buczko**. Phys. Rev. B, **41**, 5096 (1990).
21. **J.Cen, K.K.Bajaj**. Phys. Rev. B, **48**, 8061 (1993).
22. **Zhen-Yan Deng, Shi-Wei Gu**. Phys. Rev. B, **48**, 8083 (1993).
23. **D.B.Tran Thoai**. Solid State Commun., **81**, 945 (1992).
24. **Z.Y.Deng, T.R.Lai, J.K.Guo, S.W.Gu**. J. Appl. Phys., **75**, 7389 (1994).
25. **З.Флюгге**. Задачи по квантовой механике, т.1. М., Мир, 1974.
26. **Г.Бейтман, А.Эрдейи**. Высшие трансцендентные функции. М., Наука, 1974.
27. **А.Р.Кертис**. Волновые функции Кулона. М., ВЦ АН СССР, 1969.

ԷԼԵԿՏՐՈՆԱՅԻՆ ԵՎ ԽԱՌՆՈՒՐԴԱՅԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԸ ԾԱԾԿՈՒՅԹՈՎ ԳՆԴԱՅԻՆ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԿԵՏՈՒՄ

Ա.Խ. ՄԱՆԱՍԵԼՅԱՆ, Ա.Ա. ԿԻՐԱԿՈՍՅԱՆ

Արդյունարար զանգվածի մեթոդի շրջանակներում հետազոտված են էլեկտրոնային վիճակները ծածկույթով կիսահաղորդչային գնդից կազմված գնդային քվանտային կետում, գնդում և ծածկույթում լիցքակրի արդյունարար զանգվածի տարբերության հաշվառմամբ, ինչպես ջրածնանման խառնուրդի բացակայության, այնպես էլ քվանտային կետի կենտրոնում նրա առկայության դեպքում: Դիտարկված է գնդի, ծածկույթի և շրջապատող միջավայրի դիէլեկտրական հաստատունների տարբերության ազդեցությունը խառնուրդային վիճակների վրա: Թվային գնահատումները կատարված են $GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs-AlAs$ (կամ վակուում) համակարգի համար՝ գնդի, ծածկույթի շառավիղների և x համաձուլվածքային կոնցենտրացիայի տարբեր արժեքների դեպքում:

ELECTRONIC AND IMPURITY STATES IN A SPHERICAL QUANTUM DOT WITH COATING

A.KH. MANASELYAN, A.A. KIRAKOSYAN

Within the framework of the effective mass method the electronic states in a spherical quantum dot consisting of a semiconductor sphere with coating are investigated, taking into account the difference of effective mass of charge carriers in the sphere and coating both in the absence and presence of a hydrogen-like impurity at the center of the quantum dot. The effect of dielectric constant mismatch between the sphere, coating and surrounding medium on impurity states is considered. The numerical estimations are carried out for the system $GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs-AlAs$ (or vacuum) for different values of radii of the sphere, coating and alloy concentration x.

Известия НАН Армении, Физика, т.38, №2, с.97-107 (2003)

УДК 548.0

ВЛИЯНИЕ ИНТЕРФЕЙСНОГО СЛОЯ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА ПОЛУПРОВОДНИК – ЖИДКИЙ КРИСТАЛЛ НА ОРИЕНТАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ

А.О. АРАКЕЛЯН, В.М. АРУТЮНЯН, А.Л. МАРГАРЯН, В.А. МЕЛИКСЕТЯН, С.Р. НЕРСИСЯН*, Н.В. ТАБИРЯН*

Ереванский государственный университет

*BEAM Co., Florida, USA

(Поступила в редакцию 2 октября 2002 г.)

Исследованы особенности ориентационных эффектов, обусловленные формированием интерфейсного слоя на границе раздела полупроводник – жидкий кристалл. Наличие полупроводниковой подложки приводит к увеличению набега фаз и некоторому изменению времен ориентации и релаксации при обычном переходе Фредерикса. Обнаружен новый ориентационный эффект, возникающий при формировании электрического поля вдоль поверхности полупроводниковой подложки. Хотя обнаруженный и обычный ориентационные эффекты могут происходить одновременно, однако наличие одного эффекта оказывает влияние на временные характеристики другого.

Введение

Граница раздела полупроводник–жидкий кристалл (ГРПЖК) представляет из себя очень интересную и перспективную структуру как с научной, так и с прикладной точек зрения, тем более, что оба составляющих ее компонента являются одними из наиболее широко используемых материалов для разнообразных практических применений. Роль полупроводников (ПП) в современной технике трудно переоценить, так как сегодня базовым материалом подавляющего большинства элементов радиоэлектроники, микро- и оптоэлектроники являются полупроводники. Причем используются разнообразные типы твердотельных переходов, исследование каждого из которых привело к революционным изменениям в физике полупроводников и современной микроэлектронике.

Очень многообразными являются и практические приложения жидких кристаллов (ЖК) – от недорогих дисплеев, основанных на электрооптическом эффекте в ЖК, разнообразных датчиков (сейсмо- и ИК-сенсоры) до элементов современной фотоники. Такая многоплановость использования ПП и ЖК в технике обусловлена тем обстоятельством, что как те, так и другие среды очень чувствительны к таким внешним воздействиям, как электрическое поле и световое излучение, тем более, что сегодня практически весь мониторинг современной техники основан на использовании электрических и световых сигналов. Таким образом, очень заманчивым представляется комплексное использование свойств этих двух материалов в единой структуре, что должно, естественно, существенно обогатить ее функциональные возможности. При этом роль тонкого переходного (интерфейсного) слоя, образующегося на ГРПЖК, представляется очень важной, о чем свидетельствует например обнаруженное в [1] возрастание степени гигантской оптической нелинейности [2], или возникновение на ней эффекта аномального фотонапряжения [3]. Одной из наиболее существенных особенностей границы раздела (ГР) следует считать то, что во многих случаях образуются условия, позволяющие формирование тонких переходных слоев, характеризующихся двумерной электронной проводимостью, т.е. такой области, где движение электрона вдоль одной из координат ограничено [4].

Рассмотрение проблемы разнообразных переходных слоев, как сугубо твердотельных, так и образующихся на переходе твердое тело–жидкость, довольно сложно, поскольку микроскопическая структура границы раздела точно не известна. В случае твердотельных гетеропереходов возможно более или менее точное ее описание в рамках приближения эффективной массы, при моделировании переходной области таким образом, чтобы сгладить атомную структуру. В случае же перехода твердое тело–жидкость положение усугубляется, поскольку для жидкой среды приближение эффективной массы неприемлемо, и если для описания перехода полупроводник–электролит и применялись модели, где электролиту приписывалась зонная структура [5], то в случае ЖК энергетический спектр электронных состояний, насколько нам известно, вообще не рассматривался, что неудивительно ввиду сложности микроскопического строения этой среды. Можно констатировать, однако, что носители заряда у этой ГР движутся в поле довольно сложного потенциала. С одной стороны границы раздела на носители действует поле полупроводникового кристалла, характеризующееся трехмерной трансляционной инвариантностью, на которое накладывается медленно изменяющееся электрическое поле, формирующееся у поверхности полупроводника при контакте с ЖК и зависящее от приложенного извне напряжения. С другой стороны на электроны действует поле, создаваемое молекулами ЖК. На самой же ГР на носители действует поле реконструироанного слоя, возникшего при связывании "болтающихся связей" поверхностных атомов полупроводника с молекулами ЖК. Влияние этого переходного слоя, по-видимому, должно сказываться при таких исследованиях ГРПЖК, когда параметры переходного слоя могут изменяться в результате специальных воздействий электрическими полями или светом. Настоящая статья посвящена исследованию ориентационных характеристик жидкокристаллических ячеек, одна из подложек которой представляет из себя полупроводниковый монокристаллический Si.

Эксперимент

Обычно при исследовании пороговых и надпороговых характеристик (эффекта Фредерикса) жидкокристаллических ячеек используется метод прохождения лазерного луча через жидкокристаллическую ячейку и скрещенные соответственным образом поляризаторы, при наличии внешнего электрического смещения, которое и вызывает переориентацию молекул ЖК. Однако, при исследовании ЖК ячеек с подложкой из полупроводникового монокристалла вышеупомянутый метод неприемлем ввиду непрозрачности массивного полупроводникового электрода. Следовательно, для исследования таких ячеек необходимо разработать схему эксперимента, позволяющего регистрировать пороговый эффект с помощью отраженного светового пробного луча. С этой целью была собрана следующая оптическая система, представленная на рис.1.

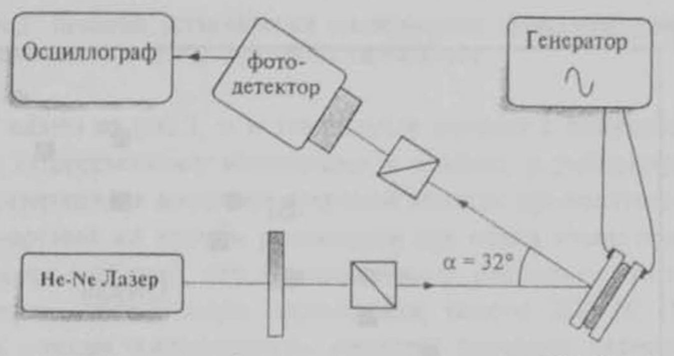

Рис.1. Оптическая схема для измерений надпороговых характеристик.

Луч He-Ne лазера с длиной волны 632,8 нм, проходя через поляризатор, падал на ЖК ячейку. Угол между вектором поляризации и директором ячейки составлял 45^0, а угол между направлением луча и нормалью к поверхности ячейки составлял ~32^0. Луч, проходя через ЖК слой ячейки, падал на поверхность полупроводника и, отражаясь от нее после прохождения через второй поляризатор, направление поляризации которого было скрещено с направлением поляризации первого, принимался фотоприемником. Полученный сигнал регистрировался с помощью осциллографа. С использованием звукового генератора на контакты ячейки подавался электрический сигнал с синусоидальной формой и частотой 1кГц. С помощью вышеописанной системы для сопоставления результатов были исследованы как ЖК ячейка с двумя обычными стеклянными подложками с индий-олово оксидным (ITO) тонким слоем, так и ячейка, одна из подложек которой представляла из себя обычное ITO стекло, тогда как другая – полупроводниковый низкоомный монокристаллический кремний. Поверхности обеих подложек ячейки были обработаны таким образом, чтобы обеспечить планарную ориентацию молекул ЖК как более подходящую для наблюдения пороговых эффектов. Отметим, что выбор относительно низкоомного полупроводника был обусловлен тем, чтобы прилагаемое к структуре смещение в основном падало бы на жидкокристаллический слой. Зазор между ITO слоем и полупроводниковой подложкой составлял 36 мкм и заполнялся нематическим жидким кристаллом (НЖК) марки Е-48.

Обсуждение результатов

Проведенные исследования показали, что порог статической переориентации для обоих типов ячеек практически одинаков и составляет примерно 2,65 В. Измеренное значение фазового набега в зависимости от приложенного напряжения (надпороговая стационарная структура) для обоих типов ячеек приведено на рис.2.

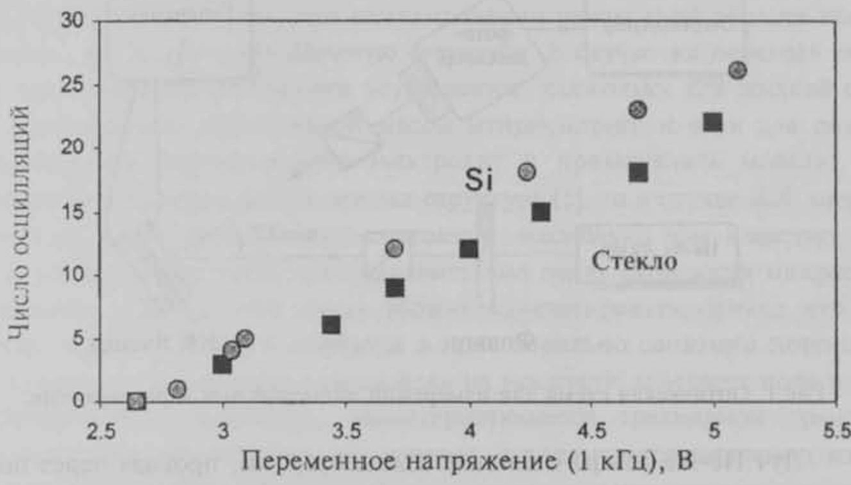

Рис.2. Зависимость числа осцилляций N (фазового набега $\Delta\Phi=2\pi N$) от внешнего смещения.

Несмотря на то, что пороговое напряжение в случае обоих ячеек одинаковое, тем не менее, имеется существенное отличие в поведении надпороговых стационарных характеристик. Действительно, как видно из рис.2, набег фазы ($\Delta\Phi$) в случае ячейки с полупроводниковой подложкой превышает $\Delta\Phi$ для обычной ячейки, причем с ростом напряжения это отличие увеличивается и достигает 8π при значении V_{ext}=5 В. Отметим, что такое различие фазовых набегов соответствует довольно большому увеличению угла переориентации в случае контакта ЖК с полупроводником.

Были исследованы и сопоставлены также времена установления и релаксации стационарной переориентации для обоих вышеупомянутых ячеек (рис.3).

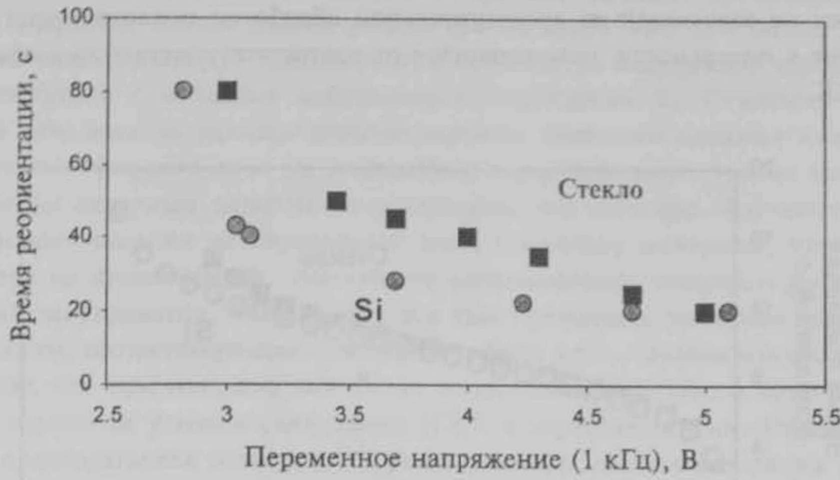

Рис.3. Времена установления стационарной переориентации в зависимости от V_{ext} для обоих типов ячеек.

Как видно из рис.3, и в этом случае контакт с полупроводником приводит к существенному изменению, а именно, к уменьшению времен переориентации в довольно широкой области приложенного напряжения. Измерения же времен релаксации для обоих ячеек практически не различаются (~25 сек), что не удивительно, поскольку эти времена в первую очередь обусловлены параметрами самого ЖК [6]. Были сопоставлены также динамические свойства процесса переориентации для обоих типов ячеек. Соответствующие результаты приведены на рис.4 и 5.

Таким образом, проведенные нами предварительные исследования позволили не только установить возможность наблюдения порогового эффекта на структуре полупроводник–ЖК в режиме отраженного луча, но и выявили заметную разницу в характеристиках, получаемых при использовании полупроводниковой подложки. Действительно, в последнем случае наблюдаются не только рост набега фаз, но и заметное изменение характерных времен процесса переориентации. Мы полагаем, что наблюдаемые отличия при прочих равных условиях обусловлены изменением условий связывания молекул НЖК с твердотельной подложкой. Такое поведение, на наш взгляд, может быть связано с тем, что в случае полупроводниковой подложки существенную роль играет поверхностный заряд, образующийся при формировании ГРПЖК и приводящий в итоге к увеличению роли полярной связи, которая в свою очередь может оказывать существенное влияние на энергию сцепления молекул НЖК с твердой кристаллической поверхностью [7]. Более того, как было показано в [8], при полярном механизме связывания НЖК на поверхности твердой подложки образуется примыкающий к ней монослой нематика, директор которого имеет характерный и практически не зависящий от предварительной обработки подложки угол наклона к поверхности, отличающийся от соответствующего угла в объеме НЖК.

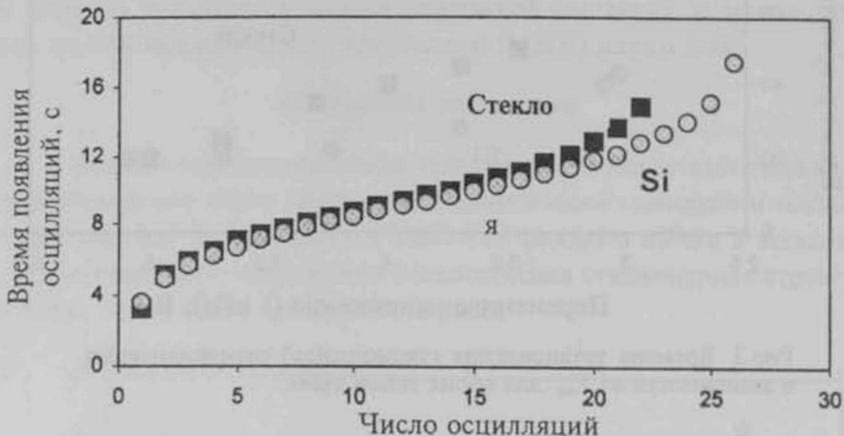

Рис.4. Времена появления осцилляций для обычной ячейки и ячейки на базе ГРПЖК.

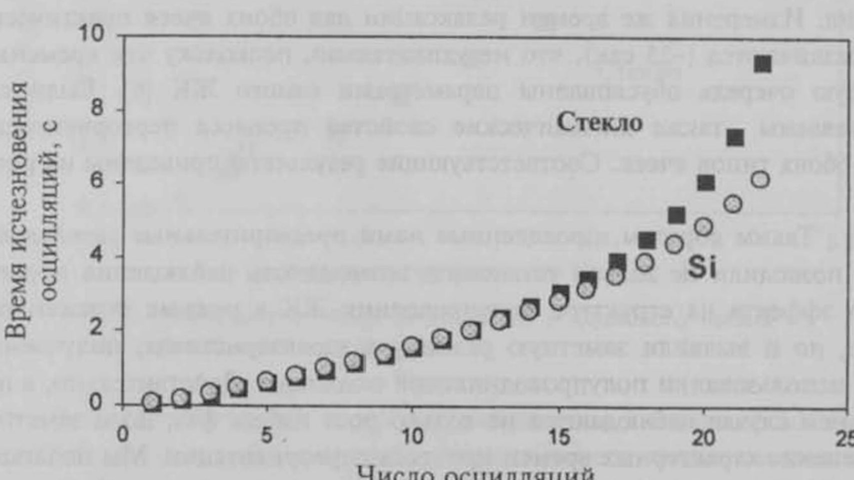

Рис.5. Времена исчезновения осцилляций для обычной ячейки и ячейки на базе ГРПЖК.

В качестве факторов, которые могли бы привести к изменению состояния поверхности полупроводника и, следовательно, к изменению условий осуществления полярных связей, могут выступать световое возбуждение или электрические поля. Действительно, генерированные светом в области пространственного заряда полупроводника неравновесные носители заряда могут привести к формированию поверхностной фотоэ.д.с., т.е. фактически к перезарядке на поверхности. В качестве возбуждающего полупроводник излучения при исследовании ориентационных эффектов можно рассматривать сам пробный луч, тем более, что длина волны (632,8 нм) используемого нами лазера находится в хорошем соответствии с областью собственного поглощения Si. Отметим, что хотя нам пока не удалось зарегистрировать заметного влияния интенсивности лазерного луча на измеряемые характеристики, тем не менее было бы неверным однозначно утверждать, что световое облучение не оказывает влияния на переходный слой, поскольку возможно, что несмотря на существенное понижение интенсивности лазерного луча во время эксперимента, ее значения все еще превышали значения интенсивности, соответствующие насыщению фото э.д.с. Следовательно, возможно, что при меньших значениях интесивности светового возбуждения изменятся условия связывания НЖК в переходном слое. Отметим, что предполагаемая возможность регулирования энергии сцепления ЖК световым лучом может иметь практическое значение при разработке пространственных модуляторов на базе ГРПЖК.

"Поверхностная ориентация"

Представляет интерес также исследование роли электрических полей, приложенных вдоль поверхности полупроводника с помощью специальных контактов, напыленных соответственно с разных сторон находящейся за пределами ячейки поверхности полупроводника. Подчеркнем, что влияние такого поля может быть особенно существенным именно в случае подложек, предварительно обработанных с целью получения планарной ориентации, поскольку направленное вдоль поверхности полупроводника поле в этом случае может оказать существенное воздействие на прилегающий к поверхности монослой нематика. Действительно, исследования, проведенные с двумя ячейками, одна из подложек которых представляла собой обычное покрытое ITO стекло, тогда как вторая была изготовлена из различных монокристаллов Si, показали, что приложение продольного поля также приводит к переориентации НЖК и, соответственно, к фазовому набегу. Отметим, что наблюдаемый эффект имеет пороговый характер, однако, как значение порога, так и число осцилляций в обоих случаях различны, как это видно из рис.6, где приведены зависимости числа осцилляций от величины "поверхностного" поля, а характерная осциллограмма нарастания и спада переориентации для одной из ячеек представлена на рис.7.

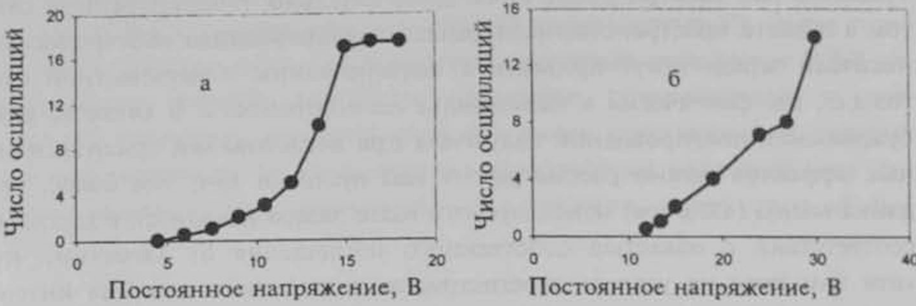

Рис.6. Число осцилляций в зависимости от величины "поверхностного" поля для двух ячеек с различными подложками из Si.

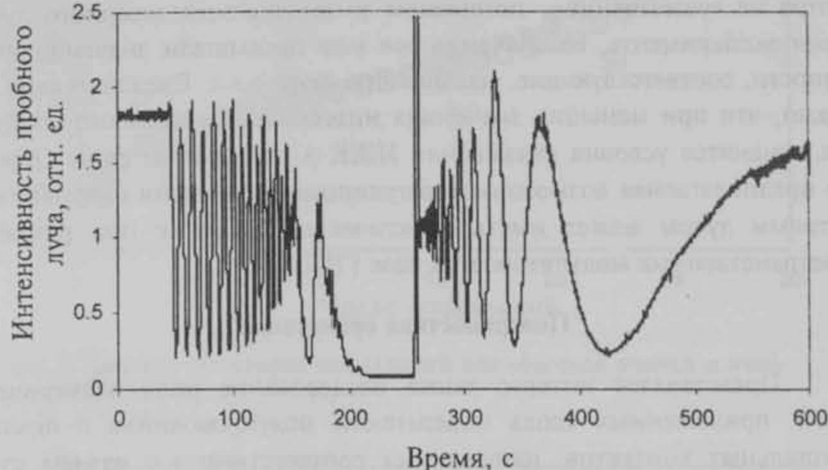

Рис.7. Динамическая характеристика ячейки с подложкой из Si при приложении продольного "поверхностного" поля; V=18 В.

Здесь следует отметить, что такое поведение может быть обусловлено самыми разными причинами; в частности, это может быть связано с тем, что при напылении контактов на поверхности разных полупроводниковых образцов контактные сопротивления не получаются идентичными, или же неодинакова поверхностная проводимость полупроводников, в результате чего значения напряженностей поля вдоль поверхности могут оказаться существенно различными при одной и той же разности потенциалов, приложенной к контактам. Возможно также, что в зависимости от состояния поверхности полупроводника молекулы НЖК в интерфейсном слое упорядочиваются неидентичным образом, что и приводит к изменениям параметров переориентации. Подчеркнем однако, что даже независимо от того, какая из вышеперечисленных причин является основной, можно сделать вывод о крайне важной роли, которую играют особенности интерфейсного слоя в процессе переориентации. Здесь следует особо отметить, что в пользу поверхностной природы эффекта, наблюдаемого при приложении постоянного поля вдоль поверхности ПП подложки, свидетельствуют и существенно различные характерные времена переориентации и последующей релаксации, наблюдающиеся при описанном эффекте в сравнении с соответствующими временами переориентации при обычном объемном эффекте. Действительно, значения характерных времен переориентации в первую очередь определяются вязкоупругими свойствами НЖК, а, следовательно, то обстоятельство, что наблюдающиеся характерные времена различаются почти на порядок, может быть обусловлено лишь существенным различием сил межмолекулярного взаимодействия между объемными молекулами НЖК и, соответственно, между молекулами НЖК и поверхностными атомами ПП. Более того, о принципиально различной природе обоих эффектов переориентации свидетельствует то обстоятельство, что более быстрый эффект обычной объемной поляризации происходит независимо и на фоне переориентации, обусловленной направленным вдоль поверхности полем, которую мы далее будем называть "поверхностной переориентацией". Действительно, это очевидно из осциллограммы, представленной на рис.8 и полученной следующим образом: сначала прикладывалось постоянное "поверхностное" поле ~15 В и после установления "поверхностной переориентации" было приложено переменное поле ~7 В между ITO и тыловым контактом к полупроводнику для обеспечения объемной переориентации. После установления обоих переориентаций сначала отключается более медленное "поверхностное" поле, а затем и объемное. В результате на фоне осцилляций, обусловленных "поверхностной переориентацией", на релаксационной характеристике хорошо видны осцилляции объемного эффекта (показанные также отдельно на фрагменте к рис.8).

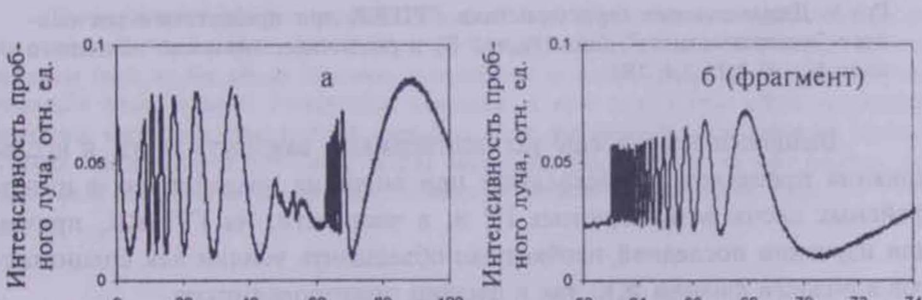

Рис.8. Динамические характеристики при приложении постоянного продольного и переменного поперечного полей.

Таким образом, можно утверждать, что оба эффекта происходят независимо друг от друга, и если механизм объемного эффекта хорошо известен и исследован, то механизм "поверхностной переориентации" предстоит еще детально исследовать, причем в первую очередь следует обратить внимание на контролируемое состояние поверхности полупроводника. Несмотря на то, что оба эффекта переориентации имеют разную природу, они тем не менее оказывают определенное влияние друг на друга, что вообще неудивительно, поскольку состояние интерфейсного слоя существенно для обоих эффектов, каждый из которых, в свою очередь, влияет на состояние интерфейсного слоя. Действительно, при одновременном приложении как объемного переменного поля, так и постоянного "поверхностного" поля динамическая картина наблюдаемых процессов переориентации существенно изменяется (рис.9). Отметим, в частности, существенное влияние объемного поля на характерные времена "поверхностной переориентации", которые, как следует из анализа рис.9, уменьшаются с ростом объемного поля до достижения им порогового значения, затем несколько возрастают вблизи порога и вновь резко уменьшаются при установлении объемной переориентации.

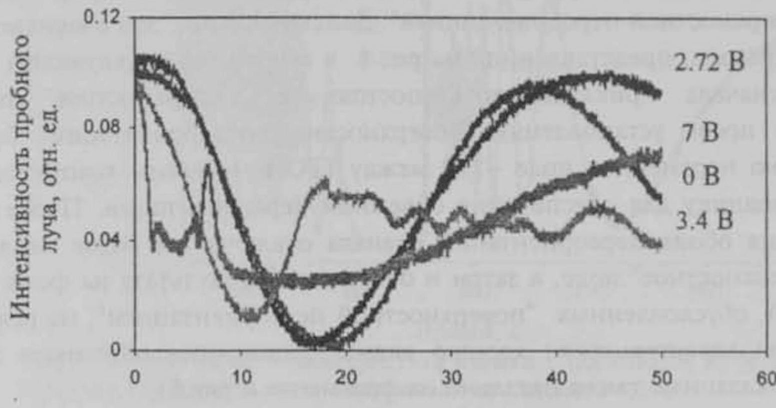

Рис.9. Динамические характеристики ГРПЖК при приложении постоянного "поверхностного" поля (V_{DC}=15 В) и различных значений объемного поля V_{AC} (0, 2,72, 3,4, 7В).

Вышеизложенное еще раз подтверждает важность учета и исследования процессов, происходящих при внешних воздействиях в интерфейсных слоях разнообразных ГР и, в частности, на ГРПЖК, причем для изучения последней необходимо объединить усилия как специалистов в области физики ЖК, так и физики полупроводников.

Авторы выражают признательность Б. Я. Зельдовичу за полезное обсуждение.

Исследования А.О.Аракеляна, В.М.Арутюняна, А.Л.Маргаряна и В.А.Меликсетяна проводились при поддержке гранта ISTC A-321.

ЛИТЕРАТУРА

1. **А.О.Аракелян** и др. Известия НАН Армении, Физика, **37**, 354 (2002).
2. **Б.Я.Зельдович, Н.В.Табирян**. УФН, **147**, 633 (1985).
3. **Р.Б. Алавердян** и др. ЖТФ, **56**, 1843 (1986).
4. **Т.Андо, А.Фаулер, Ф.Стерн**. Электронные свойства двумерных систем. М., Мир, 1985.
5. **В.М.Арутюнян**. Оптические свойства в полупроводниковых фотокатализаторах и возможности их применений. В сб. "Фотокаталитическое преобразование солнечной энергии. Гетерогенные, гомогенные и структурно-ориентированные системы", Новосибирск, Наука, 1991, с.228-294.
6. **Л.М.Блинов**. Электро- и магнитооптика жидких кристаллов. М., Наука, 1978.
7. **Л.М.Блинов, Е.И.Кац, А.А.Сонин**. УФН, **152**, 449 (1987).
8. **H.Yokoyama**, in Handbook on Liquid Crystal Research. Eds. P.Collings and J. Patel. Oxford Univ. Press, p.179, 1997.

ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴԻՉ–ՀԵՂՈՒԿ ԲՅՈՒՐԵՂ ՄԻՋՍԱՀՄԱՆԱՅԻՆ ՇԵՐՏԻ ԱԶԴԵՑՈՒԹՅՈՒՆԸ ԿՈՂՄՆՈՐՈՇԱՅԻՆ ԷՖԵԿՏՆԵՐԻ ՎՐԱ

Ա.Հ. ԱՌԱՔԵԼՅԱՆ, Վ.Մ. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Հ.Լ. ՄԱՐԳԱՐՅԱՆ,
Վ.Ա. ՄԵԼԻՔՍԵԹՅԱՆ, Ս.Ռ. ՆԵՐՍԻՍՅԱՆ, Ն.Վ. ԹԱԲԻՐՅԱՆ

Ուսումնասիրված են կիսահաղորդիչ–հեղուկ բյուրեղ միջսահմանային շերտով պայմանավորված կողմնորոշային էֆեկտների առանձնահատկությունները: Կիսահաղորդիչ տակդիրի առկայությունը բերում է փուլային շեղման ավելացման, ինչպես նաև կողմնորոշման և ռելաքսացիայի ժամանակների որոշակի փոփոխության Ֆրեդերիքսի սովորական անցման դեպքում: Հայտնաբերված է նոր կողմնորոշային էֆեկտ, որն առաջանում է կիսահաղորդիչ տակդիրին կիրառված երկայնական էլեկտրական դաշտի ազդեցության ժամանակ: Չնայած նրան, որ հայտնաբերված և սովորական կողմնորոշային էֆեկտները կարող են տեղի ունենալ միաժամանակ, այնուամենայնիվ մի էֆեկտի առկայությունը բերում է մյուսի ժամանակային բնութագրերի փոփոխության:

INFLUENCE OF A SEMICONDUCTOR–LIQUID CRYSTAL INTERFACIAL LAYER ON THE ORIENTATIONAL EFFECTS

A.H. ARAKELYAN, V.M. AROUTIOUNIAN, H.L. MARGARYAN, V.A. MELIKSETYAN,
S.R. NERSISYAN, N.V. TABIRIAN

The peculiarities of orientational effects conditioned by the interface layer formation on the semiconductor–liquid crystal interface, are investigated. The presence of a semiconductor substrate leads to the phase incursion increase and to some change in reorientation and relaxation times at usual Freedericksz transition. A new orientational effect is revealed appearing during the electric field formation along the semiconductor substrate surface. Though the discovered and usual effects take place independently of one another, the presence of one effect has an essential influence on the other's time characteristics.

Известия НАН Армении, Физика, т.38, №2, с.108-112 (2003)

УДК 548.732

УПРАВЛЯЕМАЯ ПЕРЕБРОСКА РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА КРИСТАЛЛЕ САХАРОЗЫ

М.А. НАВАСАРДЯН, А.Р. АГУМЯН, К.Т. АЙРАПЕТЯН, Р.Ц. ГАБРИЕЛЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 9 декабря 2002 г.)

Обнаружено десятикратное (и более) увеличение интенсивностей некоторых сильных рефлексов и многократное увеличение рефлексов лауэграмм у монокристаллов сахарозы ($C_{12}H_{22}O_{11}$) при создании на них температурного градиента определенной величины. На основе результатов настоящего эксперимента и данных наших прежних работ показано, что процесс управляемой переброски интенсивности имеет всеобщий характер для монокристаллов, а интенсивность дифрагированного пучка при внешних воздействиях не зависит от общего числа электронов в единице объема элементарной ячейки монокристалла.

Известно, что при наличии градиента температуры или ультразвуковых колебаний, приложенных к монокристаллам, интенсивности дифрагированных рентгеновских пучков от исследуемых монокристаллов многократно возрастают в геометрии Лауэ. Подобные работы детально обсуждались в недавно опубликованной статье [1]. При определенных величинах таких воздействий происходит полная переброска рентгеновского излучения от направления прохождения в направление дифракции [2]. На этой основе осуществлена передача и прием информации (в частности, речи) с помощью рентгеновских (проходящего и отраженных) пучков, что детально описано в работе [3]. Отметим, что до сих пор исследовались монокристаллы, состоящие из атомов с умеренными атомными номерами Z.

Целью настоящей работы было исследование кристаллов, состоящих из самых легких атомов. Эти атомы составляют основу всех биологических образований. В качестве такого кристалла был выбран кристалл сахарозы (сахара) ($C_{12}H_{22}O_{11}$), учитывая некоторые его особенности, необходимые для выполнения таких работ.

У таких кристаллов прежде всего необходимо проверить наличие влияния градиента температуры на интенсивность лауэрефлексов и попытаться найти определенную корреляцию между числом электронов в объеме рассеивателя и величиной отраженной интенсивности.

В последних из наших работ [1,4] показано, что при наличии градиента температуры или УЗ колебаний величина интенсивности отраженных пучков не зависит от числа электронов в атоме или в элементарной ячейке кристаллов со средними Z, а является следствием взаимодействия атомов внутри элементарной ячейки, обусловленного приложенными внешними воздействиями. Интересно проверить эту ситуацию для кристаллов с наименьшими количествами электронов в единице объема элементарной ячейки или в единице объема данного вещества: $\rho_{эл} = N/V$, где N – общее число электронов в элементарной ячейке, V – объем этой ячейки. У сахарозы оно равно 0,5 электронов в одном кубическом Å ($\rho_{эл} = N/V = 364/714 \approx 0.5$). Известно, что на градиент легко реагируют нецентросимметричные кристаллы (кварц, КДП, АДП), а кристалл сахарозы является именно таким кристаллом. Кроме того, до сих пор не исследованы молекулярные кристаллы, каким является сахароза. Поэтому изучение таких кристаллов открывает путь к исследованию явлений, обусловленных внешними воздействиями, у веществ биообразований, в частности, к исследованию кристаллов макромолекул, которые состоят главным образом из самых легких атомов.

Кристалл сахарозы принадлежит к моноклинной сингонии с пространственной группой P21 (структурный класс) с параметрами элементарной ячейки a = 10,86 Å; b = 8,7Å; c = 7,758 Å; β = 102,95° [5-7] с двумя молекулами в элементарной ячейке, с плотностью ρ =1,6 г/см^3 и температурой плавления T = 160°С. Для исследования выбирались плоские образцы с размерами 20×15 мм^2 и с толщинами 2 и 3.5 мм. Применялось молибденовое излучение. Исследовались как лауэграммы, так и отдельно взятые рефлексы этих же лауэграмм, используя MoK$_\alpha$ излучение.

Экспериментальные результаты

При получении лауэграмм первичный пучок направлялся вдоль оси второго порядка монокристалла (это видно из симметрии лауэграмм) или под некоторым углом относительно оси b, чтобы одновременно получить отражения от плоскостей (3,–1,–1) и (210) соответственно, используя MoK$_\alpha$ линию. Для работы с этим излучением детектором выбирается предполагаемый рефлекс и одновременным вращением кристалла и детектора с соответствующими углами (θ) и (2θ) отыскивается K$_\alpha$ линия молибдена и таким путем по формуле Брэгга определяется межплоскостное расстояние данного семейства плоскостей.

На рис.1 показаны лауэграммы от кристаллов сахарозы без температурного градиента и при наличии градиента температуры $\Delta T/\Delta x$=50 град/см. Для обоих случаев экспозиция была равна одному часу при режиме работы трубки U = 30 кВ, I = 10 мА. При наличии градиента температуры многократно возрастают интенсивности сильных рефлексов. Поскольку пучок имел лентообразую форму с большим размером поперечного сечения на вертикальной плоскости, то и рефлексы выявляются в виде узких прямоугольников с соответствующими расположениями.

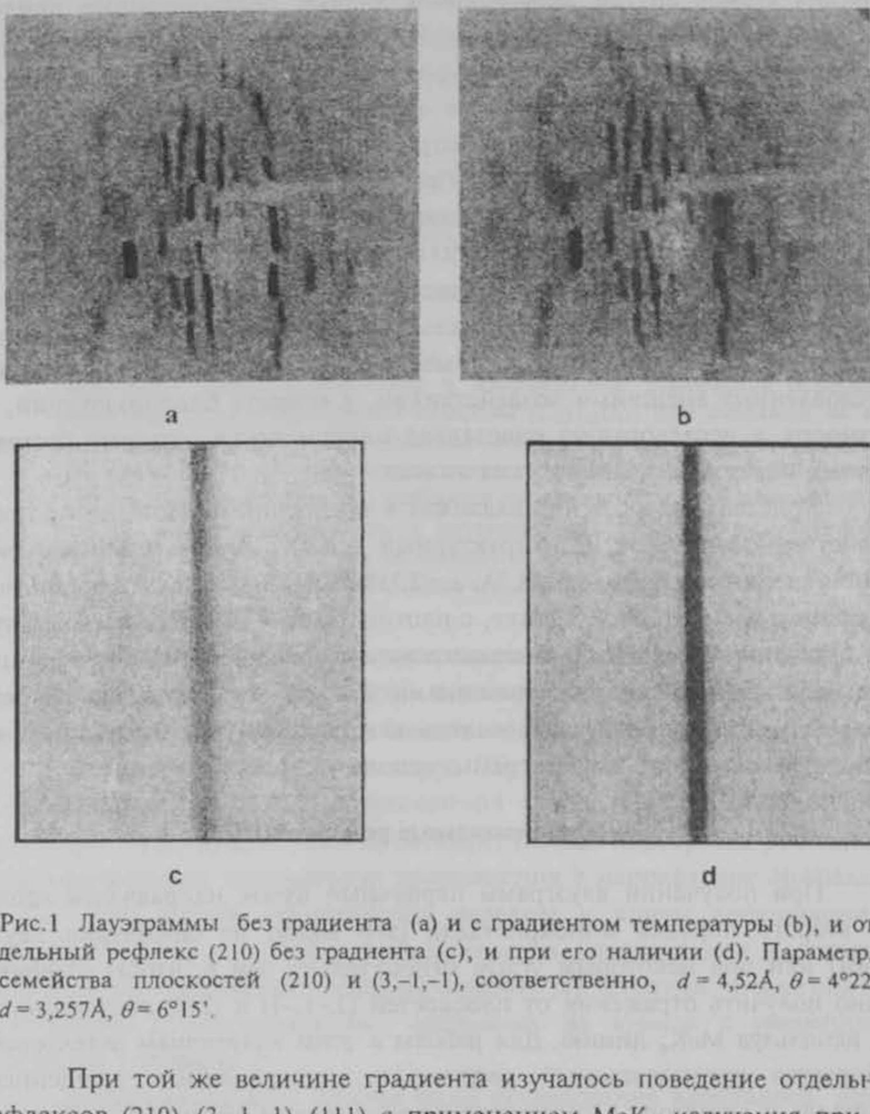

Рис.1 Лауэграммы без градиента (a) и с градиентом температуры (b), и отдельный рефлекс (210) без градиента (c), и при его наличии (d). Параметры семейства плоскостей (210) и (3,–1,–1), соответственно, $d = 4{,}52\text{Å}$, $\theta = 4°22'$; $d = 3{,}257\text{Å}$, $\theta = 6°15'$.

При той же величине градиента изучалось поведение отдельных рефлексов (210), (3,–1,–1), (111) с применением MoK_α излучения при величине $\mu t = 0.27$ и 0,47 (μ – линейный коэффициент поглощения, μ = 1,35см$^{-1}$, t – толщина образца). Коэффициент поглощения был рассчитан на основе данных справочника [8]. У сильных рефлексов (210), (3,–1,–1) при наличии вертикальной щели с шириной 0,5 мм первоначальная интенсивность дифрагированного пучка I_0 при градиенте $I_{\Delta T/\Delta x}$ увеличивается более чем в 10 раз (I_0 = 4500 имп/сек, $I_{\Delta T/\Delta x}$ = 50000 имп/сек и более).

Отдельный рефлекс (210) без градиента (1c) и с градиентом температуры (1d), соответственно, был снят на расстоянии 30 см от образца (у входа детектора), с экспозицией в одну минуту.

При градиенте увеличивается на 10-15% и общий фон на лауэграмме. В частности, фон (почернение) на лауэграмме 1b заметно больше по сравнению с фоном лауэграммы 1a.

Обсуждение и выводы

Как в прежних экспериментальных работах, выполненных на кристаллах со средними Z, так и у органического кристалла сахарозы с увеличением величины температурного градиента одновременно и многократно (десятикратно) увеличивается интенсивность сильных дифрагированных пучков (пучков, отраженных от атомных плоскостей с большими межплоскостными расстояниями), т.е. происходит управляемая переброска излучения из направления прохождения в направление дифракции (отражения). Это свидетельствует о том, что при исследовании под малыми углами аналогичное увеличение наблюдалось бы при отражении от плоскостей с еще большими межплоскостными расстояниями (с малыми углами Брэгга θ).

Резюмируя данные настоящего эксперимента и прежних экспериментальных работ, можно констатировать, что явление управляемой частичной и полной переброски для всех видов кристаллов имеет всеобщий характер.

Управляемая переброска наблюдалась нами раньше на кристаллах кварца (SiO_2), сапфира (Al_2O_3), кальцита ($CaCO_3$), сахарозы ($C_{12}H_{22}O_{11}$) и т.д. и, как показано в работах [1,4], интенсивность дифрагированного пучка при градиенте не зависит от числа электронов в элементарной ячейке, т.к. без изменения числа электронов (атомов) в рассеивающем объеме (без изменения количества облученного вещества) от этого же объема десятикратно и более увеличивается интенсивность дифрагированного (рассеянного) пучка. (При отражении от сильных рефлексов энергия проходящего пучка полностью переходит в направление отражения). Она зависит исключительно от уровня напряженного состояния, создаваемого между соседними атомами (или группами атомов) при внешних воздействиях. Фактически управляемое многократное увеличение интенсивности дифрагированного пучка наблюдается на кристалле сахарозы, в котором имеется минимальное число электронов в одном кубическом ангстреме – всего 0,5 электронов.($\rho_{эл} = N/V$ для нескольких кристаллических веществ имеет следующие значения: C алмаз (1,07), LiF(0,74), Al(0,78), Si(0,71), NaCl(0,62), SiO_2(0,8), Al_2O_3(1,17), K(0,25), Fe(2,2), Cu(2,67), Ge(1,4), Mo(2,7),W(4,7), Au(4,65), U(4,43)). Поскольку процесс влияния на интенсивность начинается при очень малых градиентах температуры, то за это ответственны либо изменение состояний электронов внешних электронных оболочек, либо деформация этих оболочек, т.к. для этих процессов требуется очень малая энергия.

Предварительные результаты этой работы представлены в тезисе [9].

ЛИТЕРАТУРА

1. **М.А.Навасардян, Р.Ц.Габриелян**. Изв. НАН Армении, Физика, **34**, 119 (1999).
2. **А.Р.Мкртчян, М.А.Навасардян, В.К.Мирзоян**. Письма в ЖТФ, **8**, 677 (1982).
3. **M.A.Navasardyan**, J. Appl. Cryst., **34**, 763 (2001).
4. **М.А.Навасардян, Р.Ц.Габриелян, К.Т.Айрапетян**. Изв. НАН Армении, Физика, **36**, 115 (2001).
5. **А.И.Китайгородский, П.М.Зоркий, В.К.Бельский**. Строение органического вещества, данные структурных исследований. 1971-1973. М., Наука, 1982.
6. **G.M.Broun, H.A.Levy**. Acta Cryst., **29**, 790 (1973).
7. **I.C.Honson, L.C.Siecker, L.H.Jenson**. Acta Cryst., **29**, 797 (1973).
8. **М.А.Блохин, И.Г.Швейцер**. Рентгеноспектральный справочник. М., 1982.
9. **М.А.Навасардян, А.Р.Агумян, К.Т.Айрапетян, Р.Ц.Габриелян**. Тезисы докладов на III нац. конференции, РСНЭ-2001, М., ИК РАН, 21-25мая 2001, стр.113.

ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՃԱՌԱԳԱՅԹՆԵՐԻ ԿԱՌԱՎԱՐԵԼԻ ՎԵՐԱՄՂՈՒՄԸ ՍԱԽԱՐՈԶԻ ԲՅՈՒՐԵՂՈՒՄ

Մ.Ա. ՆԱՎԱՍԱՐԴՅԱՆ, Հ.Ռ. ԱՂՈՒՄՅԱՆ, Կ.Տ. ՀԱՅՐԱՊԵՏՅԱՆ, Ռ.Ց. ԳԱԲՐԻԵԼՅԱՆ

Ջերմաստիճանային գրադիենտի առկայության պարագայում դիտվել է ռենտգենյան ճառագայթների կառավարելի վերամղում թեթև ատոմներից կազմված նյութի՝ սախարոզի ($C_{12}H_{22}O_{11}$) միաբյուրեղում, որտեղ գրանցվել է որոշ ռենտգենյան ռեֆլեքսների ինտենսիվության տասնապատիկ և ավելի մեծացում և լաուեգրամների ռեֆլեքսների ինտենսիվության բազմապատիկ մեծացում: Ներկա էքսպերիմենտի և նախկին աշխատանքների հիման վրա պնդվում է, որ կառավարելի վերամղումը միաբյուրեղներում ունի համընդհանուր բնույթ և որ արտաքին գործոնների առկայության պարագայում դիֆրակցված փնջի ինտենսիվությունը չի որոշվում բյուրեղի միավոր ծավալում եղած էլեկտրոնների ընդհանուր քանակով:

CONTROLLABLE REFLECTION OF X-RAYS ON CRYSTALS OF SACCHAROSA

M.A. NAVASARDYAN, H.R. AGHUMYAN, K.T. HAYRAPETYAN, R.TS. GABRIELYAN

Multiple (ten times and more) increase in intensities of separate reflections and of lauegram reflections from organic single crystals of saccharosa ($C_{12}H_{22}O_{11}$) was observed under influence of certain temperature gradient. On the base of the present experiment and the data of our previous works we show that the controllable reflection process has a common nature and the intensity of the diffracted beam under external influences does not depend on the total number of electrons per unit volume of the unit cell of the single crystal.

Известия НАН Армении, Физика, т.38, №2, с.113-122 (2003)

УДК 539.1.074

ПРИМЕНЕНИЕ ИМИТАЦИИ ДЛЯ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ КАЛИБРОВКИ КРЕМНИЕВЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ДЕТЕКТОРОВ

Г.М. АЙВАЗЯН, Г.В. БАДАЛЯН, М.А. МИКАЕЛЯН

Ереванский физический институт

(Поступила в редакцию 15 мая 2002 г.)

Описан эффективный способ энергетической калибровки полупроводниковых детекторов (ппд) различных толщин, основанный на имитации заряда, выделяемого в ппд ионизирующей частицей, с помощью генератора амплитуд, с частичным использованием α-радиоактивных источников. Приведены результаты лабораторных исследований метода для кремниевых детекторов как с большими (50–1000 мкм), так и с малыми (18–20 мкм) толщинами.

1. Введение

На экспериментальной установке "е–А", на внутреннем пучке Ереванского Синхротрона, на базе телескопов из кремниевых полупроводниковых детекторов проводились исследования по фрагментации ядер электронами больших энергий [1,2]. Используемый нами до настоящего времени метод энергетической калибровки (градуировки) ппд для определения кинетической энергии регистрируемых ядерных фрагментов, заключающийся в периодическом применении во время эксперимента α-радиоактивных источников с известными энергиями α-частиц в качестве реперных [3] обладает рядом недостатков: 1) необходимость установки α-источников на всех детекторах в телескопах, что помимо технических проблем, особенно при большом числе ппд, приводит к некоторому уменьшению рабочей поверхности детекторов, а также создает некий дополнительный фон; 2) невозможность калибровки очень тонких ппд (d<20 мкм), не вмещающих пробеги α-частиц, или же затрата значительного времени на калибровку, если возможно наклонное облучение α-частицами рабочей поверхности детектора.

Для избежания этих недостатков разработан электронный метод калибровки без использования α-источников [4,5]. Суть этого метода заключается в применении прецизионных малых емкостей на входе зарядочувствительных предусилителей (ЗПУ) и подачи на них калиброванных разностей потенциалов от генераторов, что имитирует акт выделения определенного количества заряда частицей в детекторе.

В настоящей работе в лабораторных условиях осуществлен вариант быстрой калибровки ппд без точных значений используемой имитирующей емкости и амплитуд генератора, но с частичным (разовым) использованием α-источников.

2. Постановка задачи

Как известно, в основе регистрации в ппд любого излучения лежит ионизационный эффект. Если данная заряженная частица теряет всю свою энергию в рабочей области детектора (полный пробег частицы $R \leq d$, где d – чувствительная толщина детектора), то величина сигнала пропорциональна энергии частицы E: $V=Q/c=e(E/W)/c \sim E$, где Q – выделенный заряд, c – емкость на выходе ппд, W – средняя энергия на образование одной пары электрон–дырка в веществе ппд.

С этой точки зрения, энергетическую калибровку толстых ппд легче осуществить, так как пробеги α-частиц традиционных α-источников заведомо меньше чувствительной толщины детектора. В противном случае, когда эти условия не удовлетворяются, вопрос энергетической калибровки становится нетривиальным. В принципе, можно имитировать этот заряд на входе спектрометрического тракта детектора. В работе [4] через тщательно калиброванный тестовый конденсатор емкостью 4.425 пФ на вход ЗПУ подавались прецизионные импульсы от генератора напряжения и максимальному шагу 1В соответствовало поглощение 100 МэВ энергии в кремниевом ппд (при принятом значении $W = 3.62 \pm 0.02$ эВ). При динамической входной емкости ЗПУ C_d >>100 C_c заряд, поступающий с каждым импульсом от генератора, равен $V_g \cdot C_c$, в пределах 1% [5].

При наличии генератора импульсов стабильной амплитуды становится возможной имитация различных зарядовых импульсов, т.е. различные энерговыделения в детекторе (при линейности тракта электроники в интересующей области энергии).

Наш подход основывается на том, что для некоторого ппд толщиной >50 мкм, где поглощаются все энергии α-частиц известного α-источника, от генератора – через некалиброванную малую емкость C_c подаются регулируемые амплитуды на вход ЗПУ до совмещения на шкале анализатора с соответствующими пиками α-частиц и снимается функциональная зависимость между показаниями гелипота (цифрового потенциометра генератора) и значениями энергий поглощаемых α-частиц: $N_{гел}= f(E)$. Впоследствии, используя эту зависимость для рассматриваемого ппд произвольной толщины, с помощью генератора подают различные сигналы по описанной схеме ко входу ЗПУ (рис.1), т.е. имитируются соответствующие заряды (энергии). Таким образом, получается выражение искомой калибровки $E=f(k)$, где k − номер канала анализатора. При таком способе калибровки нет необходимости точного измерения амплитуды генераторных импульсов и емкости C_c.

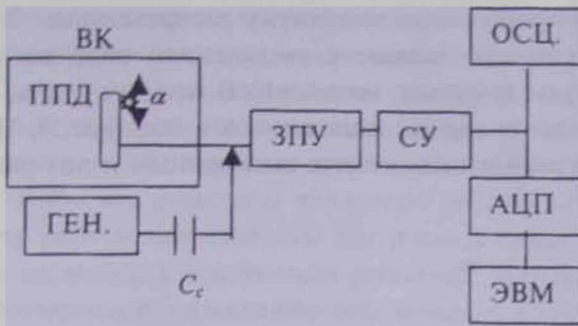

Рис.1. Функциональная схема лабораторной установки, предназначенной для исследования стандартных ппд.

Функциональная схема лабораторной установки, предназначенной для исследования стандартных ппд, приведена на рис.1. Ппд устанавливаются в откачиваемый (до 0.1–0.2 Па) вакуумный объем ВК и облучаются α-источником. Последний может быть расположен в непосредственной близости к чувствительной поверхности ппд, а затем убирается с помощью специальной ручки. Ппд соединен с ЗПУ типа П-213 ($C_д \cong 2000$ пФ) и с внешним источником напряжения (сухая батарея до 330В). С помощью делителя напряжения обеспечивается регулируемое питание детектора в интервале 0 – 200 В. После усиления в спектрометрическом усилителе (СУ) типа У-204 сигналы проходят АЦП и регистрируются в амплитудном анализаторе или в ЭВМ. Импульсы напряжения подаются, например, от ртутного генератора стабильных амплитуд. В таком качестве использован внутренний генератор амплитудного анализатора DIDAC-4000.

Для исследований были выбраны поверхностно-барьерные детекторы различных толщин: 18, 20, 30, 50, 100, 1000 мкм и с рабочей поверхностью ~ 1 см^2. Использованы два типа α-источников с различными комбинациями линий:

α1: ^{226}Ra: E_1=4.78 МэВ, E_2=5.49 МэВ, E_3=6.0 МэВ, E_4=7.69 МэВ.

α2: ^{239}Pu+ ^{238}Pu+ ^{244}Cm: E_1=5.156 МэВ, E_2=5.49 МэВ, E_3=5.806 МэВ.

В работе, помимо одиночных детекторов, использованы также совпадательные пары (“ΔE”-“E”) с толщинами соответственно 18 мкм и 1000 мкм и толщинами 24(30) мкм и 100 мкм (см. ниже).

3. Порядок выполнения работы

а) Выбор рабочего напряжения детектора.

Для детекторов при заданной энергии α-источника по схеме, приведенной на рис.1, снимается зависимость амплитуды импульсов от приложенного напряжения. В качестве амплитуды берется значение канала, соответствующего максимуму распределения. В частности, для 1000 мкм детектора вначале с увеличением напряжения наблюдается рост амплитуды импульса, но с U=100В можно считать, что происходит полное собирание заряда, выделенного в ппд (рис.2). Подчеркнем, что при всех операциях ппд остается включенным и под рабочим напряжением.

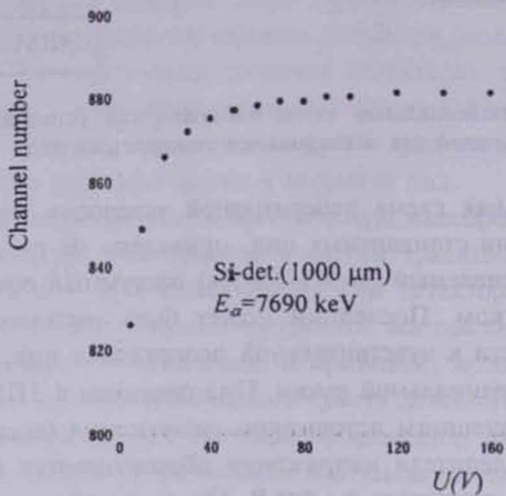

Рис.2. Зависимость амплитуды импульсов детекторов от приложенного напряжения.

б) Процедура подбора зарядного импульса.

Для выбранного ппд (например, 1000 мкм), где все α-частицы источника поглощаются, на экране получаем визуальную картину энергетических линий. Для α1 источника явно видны 4 пика гауссовой формы. Вращая ручку генератора, подаем такие амплитуды, чтобы максимумы генераторных пиков приходили в совпадение с соответствующими максимумами спектра от α-источника. В этой процедуре, когда совмещение максимумов производится визуально с помощью курсора, точность совмещения не правильнее одного канала. Для более точного совмещения максимумов поступаем следующим образом: для каждого α-пика с помощью программы “Анализ” [6] определяются его взвешенный центр, среднеквадратичное отклонение σ и ширина на полувысоте (шпв). Далее снимаются такие же параметры для соответствующих генераторных пиков. При помощи последовательного приближения, регулируя амплитуду генератора, достигается наилучшее совмещение (с точностью до одного канала) взвешенных центров соответствующих сигналов от α-источника и генератора (табл.1). Выводя показания гелипота генератора, соответствующие E_1, E_2, E_3, E_4 α-пикам, получаем зависимость $N_{гел}= f(E_{\alpha})$, которая оказалась линейной (рис.3). Анализ этой зависимости приведен ниже. Такая же процедура проведена для детекторов с толщинами 50 и 100 мкм. Для этих детекторов положения α-линий и совмещенных с ними соответствующих генераторных пиков в целом смещены на шкале анализатора. Однако показания гелипота генератора для соответствующих α-энергий оказались идентичными для всех детекторов. Далее проведена аналогичная процедура для ппд с очень малой толщиной – 20 мкм. Для того, чтобы все α-частицы полностью поглотились в этом детекторе, детектор расположен наклонно под углом φ между направлением α-частицы и нормалью к поверхности детектора. Минимальный угол наклона, соответствующий поглощению всех α-частиц в ппд, получается из выражения $\cos\varphi_{мин}=d/R(7.69 МэВ)=d(мкм)/ /46.47(мкм)$, где d – толщина ппд, R – пробег α-частицы. При d = 20 мкм φ = 65°, хотя из-за конструктивных особенностей установить этот угол было довольно трудно. Результаты измерений приведены в табл.2.

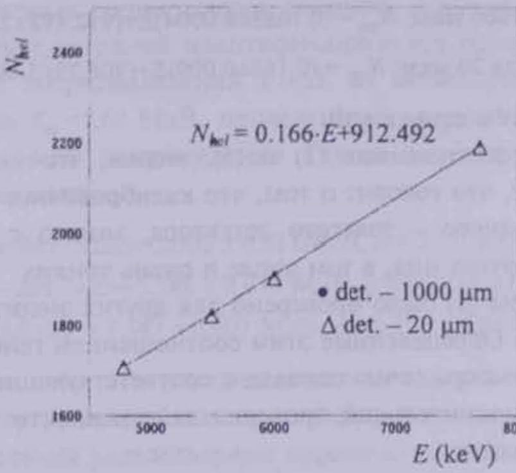

Рис.3. Зависимость подобранных показаний гелипота генератора от соответствующих энергий α-частиц α1-источника.

Табл.1. Сводные данные процедуры совмещения генераторных и α-линий. Ппд – 1000 мкм, U=120 В.

α линии	Энергия, кэВ	Взв. центр пика, Каналы	σ, Каналы	Шпв, Каналы	Генератор	Показание гелипота, Делен.	Взв. центр пика, Каналы	σ, Каналы	Шпв, Каналы
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
E1	4780	544	6	14	Гел1	1712	544	4,7	11
E2	5490	626	6,3	15	Гел2	1824	626	4,8	11
E3	6000	686	5,4	13	Гел3	1907	686	4,7	11
E4	7690	881	5,5	13	Гел4	2194	880	5,0	11

Табл.2. Сводные данные процедуры совмещения генераторных и α-линий. Ппд – 20 мкм, U=20 В.

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
E_1	4780	385	13.2	31	Гел1	1706	384	12,7	30
E_2	5490	436	12.8	30	Гел2	1821	438	12.0	28
E_3	6000	485	13.1	31	Гел3	1903	488	12.5	29
E_4	7690	624	12.2	28	Гел4	2190	628	12.5	29

4. Полученные результаты и их анализ

Из результатов совмещения генераторных пиков с энергетическими пиками α1-источника для двух детекторов (толстого – 1000 мкм и очень тонкого – 20 мкм), приведенных в табл.1,2, видно, что зависимость $N_{гел}=f(E)$ можно аппроксимировать линейной функцией (рис.3)

$$N_{гел} = aE+b. \quad (1)$$

Фитируя эту зависимость по 4-м точкам (табл.1 и 2), получаем:

$$\text{для ппд 1000 мкм: } N_{гел} = (0.1663\pm0.0004)E+(912.492\pm2.505), \quad (2)$$

$$\text{для ппд 20 мкм: } N_{гел} = (0.166\pm0.009)E+(906.79\pm5.60), \quad (3)$$

где значения энергии даны в кэВ.

Сравнивая соотношения (2) и (3), видим, что они в пределах ошибок совпадают, что говорит о том, что калибровочное соотношение, полученное для одного – толстого детектора, можно с уверенностью применять и для других ппд, в том числе и очень тонких.

Соотношение (2) было проверено для других энергий – E_1, E_3 линий α2-источника. Определенные этим соотношением генераторные пики на шкале анализатора точно совпали с соответствующими α-пиками.

В целях дополнительной проверки действенности метода проведены следующие тесты:

а) Повторена процедура измерений с 1000 мкм детектором, но с замененным блоком предусилителя. Имитационная зависимость оказалась

$$N_{гел} = (0{,}1656 \pm0{,}0005)E \pm (908{,}42 \pm 3{,}93), \quad (4)$$

что совпадает с предыдущими выражениями (2), (3), и говорит о том, что зависимости от ЗПУ нет.

б) Проведен тест с включенными во временное совпадение тонким и толстым детекторами, прокалиброванными по соотношению (2), и рассмотрен баланс энерговыделений первичных α-частиц. Здесь мы приведем результаты такого теста для телескопа детекторов «ΔE»-18 мкм, «E»-1000 мкм. α1-источник был установлен на корпусе «ΔE»-детектора. α-частицы, проходя через тонкий детектор, полностью останавливались в толстом детекторе «E».

Электронная схема 2-х трактов измерений стандартная [1,2]. Импульсы генератора заданной амплитуды одновременно подавались на входы ЗПУ обоих трактов для их калибровки. Определялись центры генераторных пиков с соответствующими энергиями (2). Результаты фитирования полученной зависимости линейной функцией приведены ниже:

$$E = AK + B \tag{5}$$

$$\text{для «}\Delta E\text{»-дет.: } \Delta E = (2{,}112 \pm 0{,}022)k + (187{,}66 \pm 27{,}62)\ \text{кэВ}, \tag{6}$$

$$\text{для «}E\text{»-дет.: } E = (2{,}207 \pm 0{,}023)k + (275{,}71 \pm 26{,}74)\ \text{кэВ}, \tag{7}$$

где k – номер канала анализатора.

Эти соотношения являются окончательной калибровочной зависимостью для определения неизвестной энергии, соответствующей зарегистрированному числу каналов.

Во время тестовой экспозиции с помощью программы TLSCOP [6] информация, поступающая от детекторов, накапливалась и отображалась на дисплее. На 2-мерной картине $(\Delta E, E)$ хорошо разделяются четыре сгустка, которые соответствуют энергиям 4-линейного α-источника. Их центры лежат на одной идентификационной гиперболе $\Delta E{\cdot}E \cong aMZ^2$. Распределения энерговыделений в «ΔE, E» детекторах и их суммы для одной α-линии E_α =7,69 МэВ, приведенные на рис.4a,b,c, аппроксимировались функцией распределения Гаусса со следующими средними значениями параметров:

$$\text{«}\Delta E\text{»-дет.: } \langle\Delta E\rangle = 2.302 \pm 0.011\ \text{МэВ},\ \sigma = 0.232 \pm 0.013\ \text{МэВ},$$

$$\text{«}E\text{»– дет.: } \langle E\rangle = 5.288 \pm 0.011\ \text{МэВ},\ \sigma = 0.197 \pm 0.009\ \text{МэВ},$$

$$\langle\Delta E + E\rangle = 7{,}587 \pm 0.007\ \text{МэВ},\ \sigma = 0.151 \pm 0.006\ \text{МэВ}.$$

Примечательно, что эти распределения между собой коррелированы, т.к. сумма потерь энергии α-частицы в двух детекторах изначально задана, и распределения удовлетворяют неравенству $\sigma(\Delta E + E) < \sigma(\Delta E) + \sigma E$ [7].

Теперь рассмотрим баланс энергии. Полученная средняя сумма энерговыделений в 2-х детекторах составляет 7,587 МэВ, что на 0,103 МэВ меньше ожидаемого значения 7,690 МэВ. Однако эта потеря энергии может быть объяснена систематической ошибкой, так как α-частица в эксперименте совпадений теряет некую часть своей энергии в электрических контактах детекторов, что не регистрируется аппаратурой. Оценка этой потери при разумных толщинах контактов – золото (2х(20-30) нм), алюминий (десятые доли микрона) как раз дают примерно эту недостающую энергию ≅ 0,1 МэВ. К тому же эта недостача меньше, чем наблюдаемая дисперсия распределения суммарной энергии.

Таким образом, тест, проведенный с совпадательным телескопом при калибровке обоих детекторов по генератору, приводит к правильному энергетическому балансу, т.е выбранный способ калибровки правильный.

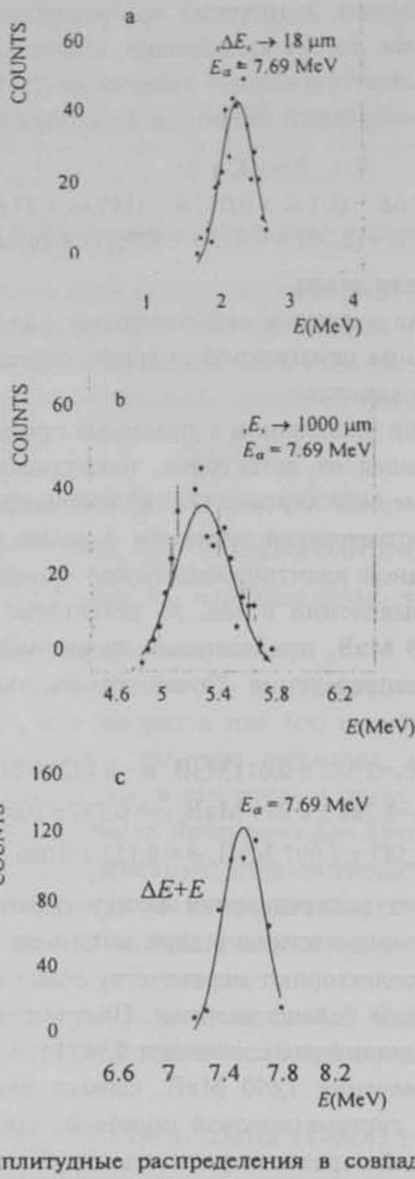

Рис.4. Амплитудные распределения в совпадательном тесте (энерговыделений в «ΔE», «E» детекторах и их суммы) для первичной α-частицы с энергией E_α = 7,69 МэВ.

Соотношения (1-3) позволяют оценить точности (разрешения) имитируемых энергий. Решая ур.(1) в отношении энергии и учитывая ошибки величин $N_{\text{гел}}$ (±2 дел), a(±0,0004 1/кэВ), b(±2,505 дел), можно по формуле среднеквадратичных отклонений для косвенных измерений [7] получить (принимая, что все величины подчиняются нормальному закону распределения)

$$\sigma_{E\text{имит}} = 1/a[(dN_{\text{гел}})^2 + E^2(da)^2 + (db)^2]^{1/2}. \quad (8)$$

В табл.3а представлены данные для ряда значений имитируемых энергий и указаны ошибки (разрешения). В качестве разрешения принята ширина на полувысоте шпв $\cong 2.35\sigma$.

Табл.3.

а) Имитируемые энергии					б) Измеряемые энергии				
E, МэВ	σ, кэВ	σ/E, %	шпв, кэВ	шпв/E, %	E, МэВ	σ, кэВ	σ/E %	шпв, кэВ	шпв/E, %
2	19.4	0.97	45.6	2.3	2	32.3	1.60	75.9	3.8
5	22.7	0.45	53.4	1.06	5	55.2	1.10	129.7	2.6
20	51.8	0,.26	121.8	0.61	20	203	1.02	477.1	2.4
100	241.3	0.24	567.1	0.56	100	1017	1.02	2390.0	2.4

Видно, что возникшие «ширины» имитируемых энергетических линий растут с энергией, но их относительные величины не превышают ~1%.

Наконец, из окончательных калибровочных соотношений (6)–(7) можно оценить точности (разрешения) для различных измеряемых энергий. Воспользовавшись снова формулой среднеквадратичных отклонений для косвенных измерений.

$$\sigma_{\text{Еизм}} = [k^2(dA)^2 + A^2(dk)^2 + (dB)^2]^{1/2} \tag{9}$$

и учитывая ошибки значений каналов $dk = \pm 1$ и параметров ($dA = \pm$ 0,023 кэВ/кан, $dB = \pm 26{,}74$ кэВ), можно получить расчетные данные для ряда значений измеряемых энергий, которые приведены в табл.3б. Видно, что неточности (разрешения) растут с измеряемой энергией, но их относительные величины не превышают 2-3%.

5. Заключение

В экспериментальном получении имитационно-калибровочной зависимости использованы ппд различных толщин и чувствительной поверхности, разные предусилители, но соотношение оказалось универсальным (см.(1)-(3)). Все это является подтверждением того факта, что для заданной области энергии имитационная связь, полученная для одного ппд, скажем толстого, может быть использована и для энергетической калибровки других. Кроме того, хотя исследованные детекторы были поверхностно-барьерного типа, можно с уверенностью сказать, что способ калибровки применим и для других типов ппд. Разработанный способ энергетической калибровки ппд будет использован на экспериментальной установке «е–А» для продолжения исследований по фрагментации ядер электронами больших энергий.

Авторы признательны Г.Г.Зограбяну, Я.Д.Нерсесяну, В.Н.Арутюняну за интерес к работе и помощь. Выполнение данной работы поддержано грантом Боннского университета (Германия).

ЛИТЕРАТУРА

1. **В.Н.Арутюнян, Г.В.Бадалян, Д.М.Бегларян** и др. Изв. АН Арм ССР, Физика, **14**, 172 (1979). Вопросы атомной науки и техники, **2**, 27 (1984).
2. **G.E.Markaryan, G.M.Aivazyan, H.V.Badalyan**, et al. J. Physics G: Nuclear and Particle Physics, **25**, 101 (1999).
3. **S.P.Avdeyev, V.A.Karnaukhov, V.D.Kuznetsov**, et al. Nuclear Instruments and Methods, **A332**, 149 (1993); ПТЭ, **4**, 7(1996).
4. **A.M.Poskanzer, J.Gilbert, W.Butler**, and **E.K.Hyde**. Phys. Rev. C., **3**, 882 (1971).
5. Методы испытаний усилителей и предусилителей, применяемых с полупроводниковыми детекторами ионизирующих излучений. Рекомендация МЭК, пуб.340, 1, 1976.
6. **Г.Г.Зограбян.** Препринт ЕРФИ-1295 (81), 1990.
7. **Дж.Тейлор**. Введение в теорию ошибок. М., Мир, 1985.

ԻՄԻՏԱՑԻԱՅԻ ԿԻՐԱՌՈՒՄԸ ՍԻԼԻՑԻՈՒՄԱՅԻՆ ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴՉԱՅԻՆ ԴԵՏԵԿՏՈՐՆԵՐԻ ԷՆԵՐԳԻԱԿԱՆ ԱՍՏԻՃԱՆԱՎՈՐՄԱՆ ՀԱՄԱՐ

Գ.Մ. ԱՅՎԱԶՅԱՆ, Հ.Վ. ԲԱԴԱԼՅԱՆ, Մ.Ա. ՄԻՔԱՅԵԼՅԱՆ

Նկարագրված է տարբեր հաստություններով կիսահաղորդչային դետեկտորների (կհդ) էներգիական աստիճանավորման էֆեկտիվ եղանակ: Այն հիմնված է ամպլիտուդային գեներատորով չափիչ սիստեմի նախնական ուժեղացուցիչի մուտքին հայտնի էներգիայով իոնացնող մասնիկի կհդ-ում անջատած լիցքի իմիտացիայի (նմանակման) վրա, սակայն հայտնի էներգիաներով α-ռադիոակտիվ աղբյուրների մասնակի օգտագործմամբ: Բերված են մեթոդի լաբորատոր հետազոտման արդյունքները թե հաստ (50-1000 մկմ) և թե բարակ (18-20 մկմ) սիլիցիումային դետեկտորների համար:

APPLICATION OF IMITATION FOR ENERGY CALIBRATION OF SILICON SEMICONDUCTOR DETECTORS

G.M. AIVAZYAN, H.V. BADALYAN, M.A. MIKAELYAN

An effective method is described for energy calibration of semiconductor detectors (SCD) with different thicknesses. The method is based on imitating the charge on the input of the preamplifier deposited in SCD by known energy ionizing particles, the imitation being performed by a pulser with a partial use of α-active sources. The results of laboratory studies of the described method are given with detectors of either large, 50–1000 μm, or small, 18–20 μm, thickness.

Известия НАН Армении, Физика, т.38, №2, с.123-129 (2003)

УДК 538.945

О ВОЗМОЖНОСТИ РАЗДЕЛЕНИЯ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В "ИДЕАЛЬНО ПРОВОДЯЩЕЕ" И "ИДЕАЛЬНО ДИАМАГНИТНОЕ" (МЕЙССНЕР) СОСТОЯНИЯ. 2. ФИЗИЧЕСКИЕ ПОСЛЕДСТВИЯ, ВЫТЕКАЮЩИЕ ИЗ "ПАРАМАГНИТНОГО" ЭФФЕКТА

С.Г. ГЕВОРГЯН

Институт физических исследований НАН Армении

(Поступила в редакцию 14 февраля 2002 г.)

В первой части этой работы [1] сделан обзор данных по недавно обнаруженному в сверхпроводниках "парамагнитному" эффекту, а также изложено возможное объяснение явления. Здесь обсуждаются последствия, вызванные этим слабо выраженным эффектом и вытекающие из анализа формы кривой фазового перехода, а также сделаны выводы, важные для верного понимания сущности сверхпроводимости.

I. Введение

Напомним, что в первой части работы [1] мы представили и подробно обсудили накопленный по сей день экспериментальный материал по "парамагнитному" эффекту. При этом мы достаточно подробно остановились на деталях измерительных установок, позволивших обнаружить и изучить этот необычный эффект, отметили особенности исследованных образцов и уточнили условия, при которых его удавалось наблюдать (что важно для верного понимания природы нового явления), а также изложили простое обяснение эффекта (не претендуя при этом на окончательность понимания явления). Ниже изложены и обсуждены возможные последствия, вызванные этим эффектом, а также сделаны заключения, непосредственно вытекающие из анализа данных опытов.

II. Заключения, вытекающие из эксперимента

На наш взгляд, накопленных данных по "парамагнитному" (ПМ) эффекту, обнаруженному в "гелиевых" (низкотемпературных) [2], а затем изученному более детально в высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП) [3-5] (во многом благодаря созданному нами измерителю свойств сверхпроводников (СП) высокого разрешения, основанного на плоской однослойной приемной катушке [6-7] – см. первую часть работы), уже достаточно, чтобы глубже объяснить физику СП перехода (образование "куперовских" пар и возможное изменение их поведения при дальнейшем охлаждении образца – особенно при температурах, близких к переходу) и на этой основе сделать выводы и новые предположения. В частности, этот новый эффект (точнее, уточненная им форма кривой перехода), по-видимому, позволяет разделить друг от друга фазовые переходы в "идеально проводящее" (состояние без сопротивления) и "сверхпроводящее" (идеально диамагнитное) состояния и связать форму кривой перехода с некоторыми физическими характеристиками нормального состояния исследуемого вещества.

Действительно, вид функции $A/((T-T_0)/T_c)+B$, аппроксимирующей начальный участок измеренной кривой СП фазового перехода, приведенной во вставке к рис.1 (аппроксимирующей начало "парамагнитного" эффекта), говорит о том, что температурная зависимость плотности $n_n(T)$ "нормальных" носителей тока (входящей в формулу (1)

$$\delta(T) = c\big/\sqrt{2\pi\sigma_1(T)\omega} \tag{1}$$

для глубины скин-слоя δ [8] как часть нормальной проводимости $\sigma_1(T) = [e^2 n_n(T)/m]\cdot\tau$ – см. первую часть работы) не может иметь упрощенный вид $n_n(T) = n\cdot(T/T_c)^\gamma$, допускаемый традиционной "двухжидкостной" моделью [9], а скорее, она более сложная. Эту зависимость вблизи перехода можно представить, к примеру, относительно более сложной функцией

$$n_n(T) \cong n\cdot\{[T_c/(T_c-T_0)]^\gamma\cdot[(T-T_0)/T_c]^\gamma + n_{res}(T)/n\}, \quad T_0 < T < T_c, \tag{2}$$

где $\gamma = 2$ (обоснование см. в первой части работы), $n_{res}(T_c) \cong 0$, а смысл T_c и T_0 приведен ниже.

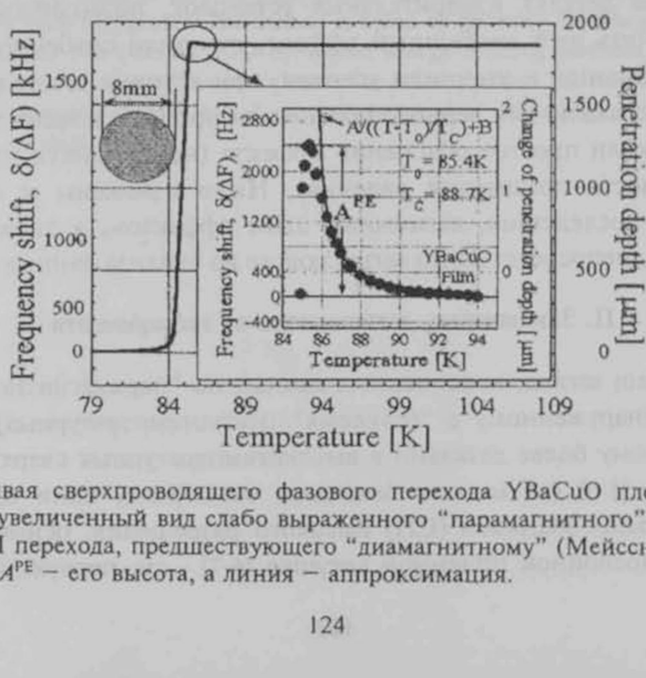

Рис.1. Кривая сверхпроводящего фазового перехода YBaCuO пленки [4-5]. Вставка: увеличенный вид слабо выраженного "парамагнитного" эффекта в начале СП перехода, предшествующего "диамагнитному" (Мейсснер) выталкиванию. A^{PE} – его высота, а линия – аппроксимация.

Остаточная плотность "нормальных" носителей тока $n_{res}(T)$ в этой формуле есть медленно растущая функция от температуры, при охлаждении. Она мала для "гелиевых" СП. Однако, как известно [10-13], в ВТСП материалах остаточное сопротивление может стать заметным во многих практически важных применениях этих веществ из-за присутствия потока нормальных носителей тока даже при абсолютном нуле температуры. Чтобы объяснить его появление, в работах [10,11] была предложена "трехжидкостная" модель, основанная на идее "неспаренных" остаточных нормальных носителей тока, $n^0_{res} \equiv n_{res}(T=0)$, причем, $n^0_{res} \equiv \mathrm{const}(T)$.

Температурная зависимость в виде (2) означает, что "нормальные" носители заряда (электроны) начинают (при $T_c \sim 88.7\mathrm{K}$ – см. рис.5 в первой части работы) и, в основном, заканчивают выполнение своей физической "миссии" в узкой температурной области $T_c \to T_0$ (где $T_0 \sim 85.4\mathrm{K}$ есть температура при пике ПМ эффекта), и их плотность становится заметно малой при приближении температуры образца к T_0 (так как $n_n(T_0) \equiv n_{res}(T_0)$, согласно (2)). Следовательно, совокупность СП пар с плотностью $n_s(T)$ в первом приближении уже успевает сформироваться ***при подходе к температуре*** T_0, при которой вещество, видимо, начинает приобретать необычное качество, заключающееся в том, что ***заметная доля пар*** (из всех созданных пар в веществе) ***начинает сильно коррелировать между собой***. Таким образом, уже при этих температурах закладывается начало формирования Бозе-конденсата из пар, ***что*** вполне ***может быть результатом обнуления суммарного "спина" у этих пар при подходе к*** T_0 (наряду с обнулением импульсов пар, начатого у созданных первых пар еще при T_c, извещающего начало перехода в "идеально проводящее" состояние в веществе). Мы полагаем, что накопление некоторого (минимально необходимого) количества пар в нулевом (синглетном) "спиновом" состоянии при подходе к T_0 (в среде, где имеются пары как в синглетном, так и в триплетном состояниях при любой отличной от нуля температуре ниже T_c) и является причиной, ведущей к началу идеально диамагнитного ("сверхпроводящего") фазового перехода в веществе, начиная с T_0. При подходе к этой температуре вещество уже успевает перейти в "идеально проводящее" состояние из-за достаточного числа созданных в нем идеально проводящих "куперовских" пар (частиц с нулевым импульсом, а поэтому и с бесконечной длиной дебройлевской волны, благодаря чему им удается двигаться в веществе, "не замечая" примесей и дефектов структуры решетки). Все это хорошо согласуется с данными, приведенными на рис.2, где показаны кривые перехода YBaCuO мостика (шириной $w \approx 0.2$ мм и длиной $L \approx 4$ мм, сделанного из пленки толщиной $d \approx 0.2$ мкм, идентичной упомянутой на рис.1, методом химического травления), измеренные стандартным 4-хпроводным методом (***сопротивление***) и нашим измерителем, по сдвигу частоты автогенератора на туннельном диоде (*диамагнитное выталкивание*), одновременно. Из рисунка видно, что переход по сопротивлению почти заканчивается (более 80%) уже до начала перехода по диамагнитным свойствам. Иначе говоря, вытеснение измерительного РЧ поля катушки образцом (переход мостика в Мейсснер-состояние) начинается, когда образец уже почти находится в состоянии с отсутствием сопротивления. Небольшая разница ~0.7K между температурами начала эффекта Мейсснера и зануления сопротивления мостика обусловлена, скорее всего, ухудшением СП свойств материала по краям мостика в процессе его приготовления. Лучшего совпадения можно ожидать при измерениях на более чистых и однородных образцах. Однако, для окончательного уточнения взаиморасположения резистивного и диамагнитного переходов необходимо, чтобы измерения были проведены на ВТСП монокристалле. Но это сделать нелегко из-за слабых сигналов от таких малоразмерных, чистых физических объектов. Хотя, по нашим последним экспериментальным оценкам [14], немного более усовершенствованному измерителю свойств сверхпроводников с миллиметровой плоской приемной катушкой эта задача уже вполне будет "по плечам" (в смысле более высокого пространственного разрешения измерений).

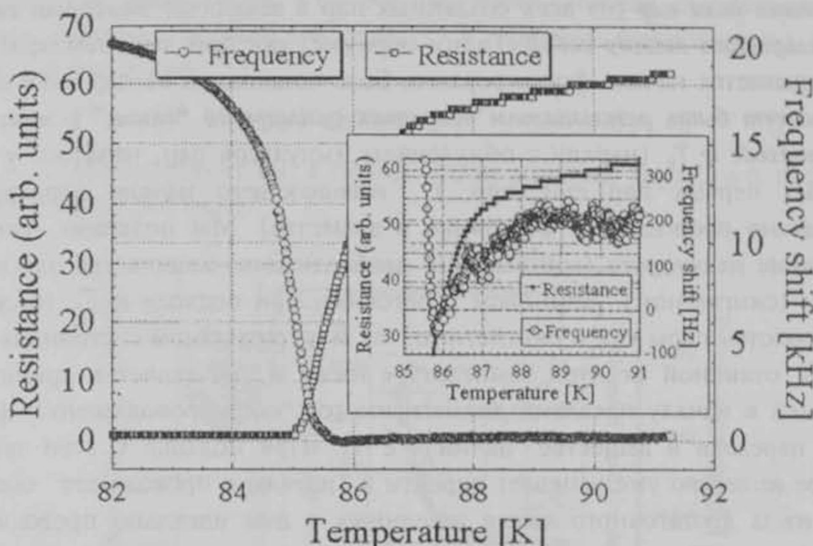

Рис.2. Кривые СП фазового перехода YBaCuO мостика (ширина $w \approx 0.2$ мм, длина $L \approx 4$ мм, толщина $d \approx 0.2$ мкм), изготовленного химическим травлением качественной пленки, измеренные одновременно. Вставка: увеличенный вид кривых в начале перехода (до "диамагнитного" выталкивания). □ – 4-хпроводный метод (**сопротивление**). o – метод, основанный на плоской приемной катушке, схематически показанный на рис.1 в первой части работы (по сдвигу частоты автогенератора на туннельном диоде – **диамагнитное выталкивание**).

Дальнейшее охлаждение образца ниже T_0 ведет, скорее всего, к изменению поведения СП вещества, описываемого известной теорией БКШ (хорошо работающей в случае "гелиевых" (простых) СП [15]), на базе все еще присутствующих в веществе (но немногих) "нормальных" носителей заряда (убывающих по закону $n_n(T) \equiv n^0_{res} + [n_{res}(T_0) - n^0_{res}] \cdot (T/T_0)^\gamma$; $T < T_0$) и уже сформировавшегося достаточно большого количества "куперовских" пар плотностью $n_s(T) = n - n_n(T) \equiv n - n^0_{res} - [n_{res}(T_0) - n^0_{res}] \cdot (T/T_0)^\gamma$, $(T < T_0)$, где число "неспаренных" остаточных нормальных носителей заряда $n^0_{res} \neq 0$ для "азотных" (сложных, "оксидных") сверхпроводников, ($n^0_{res} \equiv 0$ для "гелиевых" (простых) СП).

Изложенные выше выводы являются следствием уточненной формы кривой СП фазового перехода (рис.1) и противоположны признанным представлениям, согласно которым месторасположение резистивного и диамагнитного переходов практически совпадает, а число "куперовских" пар нарастает при охлаждении по простому закону $n_s(T) = n \cdot [1 - (T/T_c)^\gamma]$, [9], начиная с начала диамагнитного выталкивания T_c (в наших обозначениях – по закону $n_s(T) = n \cdot [1 - (T/T_0)^\gamma]$, начиная с температуры T_0).

В заключение подчеркнем, что именно скорректированная "парамагнитным" эффектом форма кривой СП фазового перехода вещества (рис.1) приводит к мысли, что определяемые ею температуры T_c (начало ПМ эффекта - начало расхождения кривых на рис.5 в первой части работы) и T_0 (пик ПМ эффекта) связаны с двумя "идеальными" свойствами СП вещества (и обусловленными ими фазовыми переходами). Так, первая из них (T_c) указывает на начало наступления идеальной проводимости (видимо, связанной с началом образования "куперовских" пар из свободных электронов с противоположными импульсами), а вторая (T_0) – оповещает начало наступления идеального диамагнетизма (с обнулением еще и суммарного "спина" у заметного количества пар). Кроме того, согласно уравнению (1), обусловленная ПМ эффектом начальная часть кривой перехода должна быть связана с такими важнейшими характеристиками нормального состояния СП вещества, как m (эффективная масса электрона), τ (время релаксации носителей заряда) и n_n (плотность "нормальных" носителей).

Насколько такая интерпретация физических процесов, определяющих "истинную" (уточненную "парамагнитным" эффектом) форму кривой сверхпроводящего фазового перехода верна, а также, является ли прогнозируемая уравнением (1) связь между формой этой кривой и характеристиками нормального состояния вещества правильной, покажут дополнительные исследования в этой области. Окончательные ответы на эти вопросы могут быть получены в результате дополнительных экспериментальных исследований на монокристаллических ВТСП образцах, с применением измерительной техники, к примеру, аналогичной использованной в настоящей работе, но с намного более высоким пространственным разрешением (имеющей размеры приемной плоской катушки ~1мм).

Работа частично финансировалась из государственных источников Республики Армения в рамках научно-исследовательской темы №02-1359. Автор благодарен профессорам Э.Г.Шароянy и Alex Gurevich (University of Wisconsin-Madison, USA) за полезные обсуждения результатов эксперимента и проблемы в целом, А.А.Мовсисяну, В.С.Геворгяну, О.Г.Шириняну и А.М.Манукяну за всестороннюю помощь при проведении экспериментов, а также А.М.Мирзоян и Г.М.Манукян за техническую помощь при окончательном оформлении работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. **С.Г.Геворгян**. Изв. НАН Армении, Физика, **38**, 50 (2003).
2. **С.Г.Геворгян**. Кондидатская диссертация. Аштарак, 1989.
3. **V.F.Gantmakher, N.I.Golovko, I.G.Naumenko, A.M.Neminsky**, and **A.V.Petinova**. Physica C, **171**, 223 (1990).
4. **S.G.Gevorgyan, T.Kiss, T.Ohyama, M.Inoue, A.A.Movsisyan, H.G.Shirinyan, V.S.Gevorgyan, T.Matsushita**, and **M.Takeo**. Superconductor Science and Technology, **14**, 1009 (2001).
5. **S.G.Gevorgyan, T.Kiss, H.G.Shirinyan, A.A.Movsisyan, V.S.Gevorgyan, S.Egashira, Yu.Eltsev, T.Matsushita, T.Mito**, and **M.Takeo**. Proc. of the Applied Superconductivity Conference (ASC '2002) (Houston, Texas, USA, 4-9 August, 2002), Program No.2MC04, p.172 (to be published in: June 2003 issue of the IEEE Transactions on Applied Superconductivity).
6. **S.G.Gevorgyan, T.Kiss, A.A.Movsisyan, H.G.Shirinyan, Y.Hanayama, H.Katsube, T.Ohyama, M.Takeo, T.Matsushita**, and **K.Funaki**. Rev. Sci. Instrum., **71**, 1488 (2000).
7. **S.G.Gevorgyan, T.Kiss, T.Ohyama, A.A.Movsisyan, H.G.Shirinyan, V.S.Gevorgyan, T.Matsushita, M.Takeo**, and **K.Funaki**. Physica C: "Superconductivity and its Applications", **366**, 6 (2001).
8. **Э.А.Канер, В.Ф.Гантмахер**. УФН, **94**, 193 (1968).
9. **C.J.Gorter** and **H.B.G.Casimir**. Phys. Zs., **35**, 963 (1934) [Zs. Techn. Phys., **15**, 539 (1934)].
10. **G.Muller, N.Klein, A.Brust, H.Chaloupka, M.Hein, S.Orbach, H.Piel**, and **D.Reschke**. J. Superconductivity, 3, 235 (1990).
11. **T.Imai** and **Y.Kobayashi**. IEEE Transactions on Electronics, **78-C**, 498 (1995).
12. **O.G.Vendik, I.B.Vendik**, and **D.I.Kaparkov**. IEEE Transactions on Microwave Theory and Techn., **46**, 469 (1998).
13. **I.B.Vendik**. Superconductor Science and Technology, **13**, 974-982 (2000).
14. **S.G.Gevorgyan, T.Kiss, S.Egashira, T.Mito, M.Takeo, H.G.Shirinyan, A.M.Manukyan**, and **A.A.Movsisyan**. Abstracts of the Applied Superconductivity Conference (ASC '2002) (Houston, Texas, USA, 4-9 August, 2002), Program No. 1ED08, p.13.
15. **J.Bardeen, L.Cooper, J.Schrieffer**. Phys. Rev., **108**, 1175 (1957).

"ԻԴԵԱԼԱԿԱՆ ՀԱՂՈՐԴԻՉ" ՈՒ "ԳԵՐՀԱՂՈՐԴԻՉ" (ՄԵՅՍՆԵՐ ՎԻՃԱԿ) ՓՈՒԼԱՅԻՆ ԱՆՑՈՒՄՆԵՐԻ ՀՆԱՐԱՎՈՐ ԱՌԱՆՁՆԱՑՄԱՆ ՄԱՍԻՆ.

2. "ՊԱՐԱՄԱԳՆԻՍԱԿԱՆ" ԷՖԵԿՏԻՑ ԲԽՈՂ ՖԻԶԻԿԱԿԱՆ ՀԵՏԵՎՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԸ

Ս.Գ. ԳԵՎՈՐԳՅԱՆ

Աշխատանքի առաջին մասում շարադրված ու քննարկված են գերհաղորդիչներում վերջերս հայտնաբերված "պարամագնիսական" երևույթի հետ կապված առ այսօր ձեռք բերված բոլոր փորձարարական արդյունքները, ինչպես նաև տրված է երևույթի հնարավոր բացատրությունը: Այստեղ քննարկված են "պարամագնիսական" երևույթով ճշգրտված գերհաղորդիչ փուլային անցման կորի ձևից բխող հետևանքները, ինչպես նաև արված են փորձերի արդյունքներից բխող հետևություններ, որոնք կարևոր են գերհաղորդականության բնույթը ճիշտ հասկանալու համար:

ON THE POSSIBILITY OF SEPARATION OF THE "IDEAL CONDUCTIVE" AND "SUPERCONDUCTIVE" (MEISSNER STATE) PHASE TRANSITIONS.

2. PHYSICAL CONSEQUENCES FOLLOWING FROM THE "PARAMAGNETIC" EFFECT

S.G. GEVORGYAN

In the first part of this work an overview of the available data on a recently discovered in superconductors "paramagnetic" effect has been made and a possible explanation of the effect is given. Here, the consequences caused by this weakly expressed phenomenon, and following from the analysis of the shape of the transition curve, are discussed, and the conclusions based on the test data are formulated, important for true understanding of the nature of superconductivity.

Известия НАН Армении, Физика, т.38, №2, с.130-133 (2003)

УДК 548.0

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОЛИТА НА НАДМОЛЕКУЛЯРНУЮ СТРУКТУРУ ЛИОТРОПНОГО ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА

Х.М. КАЗАРЯН, Г.Г. БАДАЛЯН, М.С. СТЕПАНЯН,
М.Х. МИНАСЯНЦ, А.А. ШАГИНЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 11 октября 2002 г.)

Методами поляризационной микроскопии и малоугловой рентгенографии исследовано влияние неорганической соли NaCl на надмолекулярную структуру и концентрационные интервалы существования лиотропно-жидкокристаллических (ЛЖК) фаз системы пентадецилсульфонат натрия–вода. Показано, что добавление к системе небольших количеств NaCl оказывает существенное влияние на характер текстур и концентрационные интервалы существования фаз.

Ранее нами было установлено, что в высококонцентрированных растворах пентадецилсульфонат натрия (ПДСН)–вода возникают ЛЖК фазы, чувствительные к концентрации ПДСН и к разным добавкам [1,2].

В настоящей работе сделана попытка выявить корреляцию между молекулярной и надмолекулярной структурой ЛЖК. Работа выполнена на поляризационном микроскопе и на рентгеновской установке УРС-2. Использовалась трубка БСВ-29 с антикатодом Cu, дающая излучение в области $K_\alpha \sim 1.54$ Å. Линии K_β меди выделялись с помощью никелевых фильтров. Рентгеновские лучи, проходя через фильтр, диафрагму и коллиматор, падали на образец и после дифракции регистрировались на пленке.

Образцы готовились следующим образом. Между двумя покровными стеклами вводились водные суспензии мезогенного вещества (ПДСН) определенных концентраций. Исследовались системы ПДСН–вода–NaCl при разных весовых концентрациях ПДСН. Было показано, что в системе ПДСН – вода в зависимости от концентрации имеет место изменение текстур от полигональной к веерной и от веерной к конфокальной (рис.1).

Добавление к системе небольших количеств (вес до 1%) NaCl приводит к изменению характера текстур и концентрационных интервалов существования фаз. Как показывают опыты, электролит приводит к сдвигу границ фазовых областей существования этих текстур. Несмотря

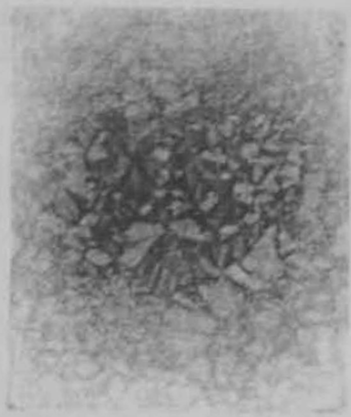

Рис.1. Переход от полигональной к веерной текстуре.

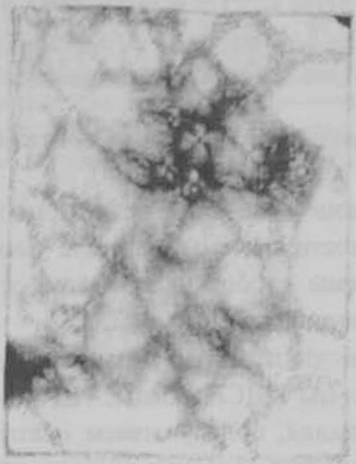

Рис.2. Сдвиг границы существующих текстур.

на то, что феноменологическая R-теория утверждает, что неорганические соли должны приводить к уменьшению межмолекулярных гидрофильных взаимодействий и, следовательно, к сдвигу границы в сторону больших концентраций амфифиля [3], нами получено, что электролит в таких системах приводит к сдвигу границы существования текстур в сторону меньших концентраций амфифиля (рис.2). Полученное несоответствие, согласно механизму, предложенному в работе [4], объясняется диссоциацией NaCl на Na^+ и Cl^- и возникновением гетерогенности системы в присутствии NaCl с образованием свободной фазы воды, которая не участвует в образовании ЛЖК. Это означает, что концентрация воды, участвующей в образовании ЛЖК, уменьшается, и те текстуры, которые существуют при больших концентрациях амфифиля, появляются уже при меньших концентрациях амфифиля. Интересен и тот факт, что в таких системах образуется новый вид текстуры, которая не присуща бинарному ЛЖК (ПДСН–вода). Новая гибридная фаза является менее двулучепреломляющей по сравнению с веерной и конфокальной (рис.3).

Рис.3. Гибридная фаза менее двулучепреломляющая.

Наличие в образце свободной воды приводит к уменьшению характеристической вязкости системы. О факте уменьшения характеристической вязкости системы сообщалось и в работе [5], однако причина этого явления не объясняется.

Сопоставляя рисунки, полученные методом поляризационной микроскопии для системы ПДСН–вода и ПДСН–вода–NaCl, снятые при одинаковых концентрациях, обнаруживаем некоторое укрупнение веерных текстур, что объясняется ориентирующим действием электролита на жидкокристаллическую систему. Причиной этого является уменьшение или исчезновение доменных водных границ между двумя соседними доменами, вызванное диссоциацией NaCl [6].

Таким образом, наличие электролита (NaCl) в жидкокристаллической системе ПДСН–вода приводит к изменению характера текстур и концентрационных интервалов существования фаз, а также к уменьшению вязкости системы.

ЛИТЕРАТУРА

1. **А.А.Шагинян.** Коллоид. журн., **40**, 297 (1978).
2. **Г.Г.Бадалян, А.А.Шагинян.** Биофизика, **33**, 92 (1988).
3. **В.А.Закарян, А.А.Шагинян.** Биофизика, **31**, 37 (1986).
4. **E.L. Fuckenstein.** Chem. Phys., **109**, 6999 (1999).
5. **J.Zipfel, J.Berghausen, P.Zinder, W.Rechtering.** J. Phys. Chem. B, **103**, 2841 (1999).
6. **А.А.Шагинян, Г.Г.Бадалян и др.** Биофизика, **42**, 615 (1997).

ԷԼԵԿՏՐՈԼԻՏԻ ԱԶԴԵՑՈՒԹՅՈՒՆԸ ԼԻՈՏՐՈՊ ՀԵՂՈՒԿ ԲՅՈՒՐԵՂԻ ԳԵՐՄՈԼԵԿՈՒԼԱՅԻՆ ԿԱՌՈՒՑՎԱԾՔԻ ՎՐԱ

Խ.Մ. ՂԱԶԱՐՅԱՆ, Հ.Գ. ԲԱԴԱԼՅԱՆ, Մ.Ա. ՍՏԵՓԱՆՅԱՆ,
Մ.Խ. ՄԻՆԱՍՅԱՆՑ, Ա.Ա. ՇԱՀԻՆՅԱՆ

Բևեռացուցչային միկրոսկոպիայի և փոքր անկյունային ռենտգենագրական եղանակներով հետազոտված է NaCl անօրգանական աղի ազդեցությունը պենտադեցիլսուլֆատ նատրիում–ջուր համակարգի գերմոլեկուլային կառուցվածքի և լիոտրոպ հեղուկ բյուրեղային փուլերի գոյության կոնցենտրացիոն միջակայքերի վրա: Ցույց է տրված, որ տվյալ համակարգին փոքր քանակությամբ NaCl-ի ավելացումը իրական ազդեցություն է գործում տեքստուրաների բնույթի և փուլերի գոյության կոնցենտրացիոն միջակայքերի վրա:

INFLUENCE OF AN ELECTROLYTE ON THE SUPERMOLECULAR STRUCTURE OF A LYOTROPIC LIQUID CRYSTAL

Kh.M. KAZARYAN, G.G. BADALYAN, M.A. STEPANYAN,
M.Kh. MINASYANTS, A.A. SHAGINYAN

The inorganic NaCl salt influence on the supermolecular structure and concentration intervals of the existence of a lyotropic liquid crystalline phase of the pentadecylsulfonate sodium of water is investigated by the polarization microscopic and X-ray methods. It is shown that when a small quantity of NaCl is added to the system, it has an essential influence on the character of textures and the concentration intervals of the phase existence.

ԲՈՎԱՆԴԱԿՈՒԹՅՈՒՆ

CONTENTS

1300 др.

СОДЕРЖАНИЕ

Заказ №218. Тираж 150.
Сдано в набор 5.03.2003. Подписано к печати 21.03.2003.
Печ. л. 4,25. Бумага офсетная. Цена договорная.
Типография издательства "Гитутюн" НАН РА.
375019, Ереван, пр. Маршала Баграмяна, 24.