ISSN 0002-3035

ФИЗИКА- Эрорци-рнузіся



ИЗВЕСТИЯ НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК АРМЕНИИ

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱՉԳԱՅԻՆ ԱԿԱՂԵՄԻՍՅԻ

> PROCEEDINGS OF NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF ARMENIA

41, N5, 2006

ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ՀԱՆՐԱՊԵՏՈՒԹՅԱՆ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱ НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК РЕСПУБЛИКИ АРМЕНИЯ

зьльчичье известия **БРДРЧЦ ФИЗИКА**

.

دעושאר דסא 41

Nº 5

ԵՐԵՎԱՆ

EPEBAH

2006

© Национальная Академия наук Армении Известия НАН Армении, Физика

. .

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

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

В. М. Арутюнян, главный редактор

Э. Г. Шароян, зам. главного редактора

- А. А. Ахумян
- Г. А. Вартапетян
- Э. М. Казарян
- А. О. Меликян
- А. Р. Мкртчян
- Д. Г. Саркисян
- Ю. С. Чилингарян
- А. А. Мирзаханян, ответственный секретарь

ԽՄԲԱԳՐԱԿԱՆ ԿՈԼԵԳԻԱ

- Վ. Մ. Հարությունյան, գլխավոր խմբագիր
- է. Գ. Շառոյան, գլխավոր խմբագրի տեղակալ
- Ա.Ա.Հախումյան
- Հ. Հ. Վարդապետյան
- Ե. Մ. Ղազարյան
- Ա. Հ. Մելիքյան
- Ա. Ո. Մկրտչյան
- Դ. Հ. Սարգսյան
- Յու. Ս. Չիլինգարյան
- Ա. Ա. Միրզախանյան, պատասխանատու քարտուղար

EDITORIAL BOARD

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

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

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

Editorial address: 24-g. Marshal Bagramyan Av., Yerevan, 375019. Republic of Armenia. УДК 538.945

ДИНАМИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ КВАНТОВЫХ ВИХРЕЙ В СВЕРХПРОВОДНИКАХ ВТОРОГО РОДА

Д.М. СЕДРАКЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 12 июля 2006 г.)

Получена система динамических уравнений, описывающая движение магнитных квантовых вихрей в сверхпроводниках второго рода при T = 0. Из этих уравнений выведено уравнение релаксации плотности вихревой решетки (или сверхпроводящего тока) и найдено его стационарное решение. Стационарное значение плотности вихревой решетки соответствует условию исчезновения сверхпроводящего тока в сверхпроводнике и определяется только заданием внешнего магнитного поля.

1. Введение

В сверхпроводниках второго рода при магнитных полях $H > H_{c1}$ имеется так называемое "смешанное состояние", при котором магнитное поле входит в сверхпроводник в виде Абрикосовских вихрей. Уравнение, описывающее усредненную по вихрям магнитную индукцию **В** в сверхпроводнике при постоянном магнитном поле **H**, имеет вид

$$\lambda^2 \operatorname{rotrot} \mathbf{B} + \mathbf{B} = \Phi_0 n \mathbf{v} \,, \tag{1.1}$$

где **v** – единичный вектор в направлении вихрей, λ – лондоновская глубина проникновения, $\Phi_0 = hc/2e$ – квант магнитного потока, h – постоянная Планка, c – скорость света, e – электрический заряд сверхпроводящего электрона, n – плотность квантованных вихрей и равняется

$$n = \frac{|\mathbf{B}|}{\Phi_0} = \frac{f(H)}{\Phi_0} \,. \tag{1.2}$$

Здесь функция $|\mathbf{B}| = f(H)$ определена заданием статистически равновесной конфигурации вихревых нитей, обеспечивающей минимум потенциала Гиббса системы [1].

При изменении внешнего магнитного поля **H** система вихревых нитей должна измениться так, чтобы соответствовать новому значению магнитного поля. Это изменение обеспечивается перестройкой вихревых нитей, движение которых должно вызываться сверхпроводящими токами, возбуждаемыми изменяющимся внешним магнитным полем. Процесс установления нового распределения вихревых нитей будет характеризоваться

временем релаксации τ , которая, как увидим ниже, будет зависеть как от плотности вихревых нитей, так и от коэффициента трения η этих вихрей [1].

Данная статья посвящена обобщению уравнения (1.1) в случае переменных полей, усредненных по вихревой решетке, и получению уравнений, описывающих релаксацию вихревых нитей. В п.2 получено обобщение уравнения (1.1) в случае переменных полей. В следующем п.3 найдены радиальные и азимутальные скорости вихревых нитей в зависимости от распределения сверхтекучих токов. Далее выводится уравнение, описывающее релаксацию системы вихревых нитей.

2. Динамические уравнения движения вихревых нитей

Как известно, для сверхтекучей жидкости при наличии вихрей уравнение, описывающее сверхтекучее движение при T = 0, имеет вид [2]

$$\operatorname{rot}\mathbf{V}_{\mathbf{s}} = \chi n_1 \mathbf{v}_1, \tag{2.1}$$

где $\mathbf{V}_{\mathbf{s}}$ – сверхтекучая скорость, \mathbf{v}_1 – единичный вектор в направлении вихрей, $\chi = \pi \hbar / m$, где m и \hbar – соответственно, масса сверхтекучей частицы и постоянная Планка, а n_1 – плотность вихревых нитей. Здесь предполагается, что $\mathbf{V}_{\mathbf{s}}$ и n_1 в общем случае есть функции от координат и времени. В частном случае, при $n_1 = 0$ уравнение (2.1) переходит в известное требование Ландау для сверхтекучей скорости.

Обобщение уравнения (2.1) в случае сверхпроводящих вихрей при T = 0 можно записать в следующей форме:

$$\operatorname{rot}\mathbf{M} = \mathbf{v}\Phi_0 n , \qquad (2.2)$$

где

$$\mathbf{M} = \frac{mc}{e^2 n_s} \mathbf{j}_s + \mathbf{A} .$$
 (2.3)

Здесь \mathbf{j}_{s} – сверхпроводящий ток, \mathbf{A} – вектор-потенциал магнитного поля $\mathbf{B} = \operatorname{rot} \mathbf{A}$, *m* и n_{s} – соответственно, масса и плотность сверхпроводящих электронов. Можно убедиться, что если подставить уравнение (2.3) в (2.2) и учесть уравнение Максвелла $\operatorname{rot} \mathbf{B} = (4\pi/c)\mathbf{j}_{s}$, то можно получить уравнение (1.1). Обобщенное нами уравнение (2.2) удовлетворяется, когда функции \mathbf{M} , \mathbf{j}_{s} и \mathbf{A} зависят от координат и времени. Чтобы замкнуть динамические уравнения, описывающие движение вихревых нитей, необходимо добавить к уравнению (2.2) уравнение сохранения вихревых нитей

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \operatorname{div}(n\mathbf{V}_{\mathbf{L}}) = 0, \qquad (2.4)$$

где V_L – скорость вихревых нитей, и уравнение, определяющее скорость движения вихревых нитей. Последнее уравнение можно получить из равенства нулю суммы сил, действующих на вихрь.

При течении сверхпроводящего тока на единицу длины вихря с потоком Φ_0 будет действовать сила, определяющаяся формулой

$$\mathbf{F}_{\mathbf{m}} = \frac{e}{c} n_s \Phi_0 [(\mathbf{V}_{\mathbf{s}} - \mathbf{V}_{\mathbf{L}}), \mathbf{v}], \qquad (2.5)$$

где V_s выражается через сверхпроводящий ток j_s как $V_s = j_s / en_s$. Сила (2.5) есть аналог силы Магнуса в сверхтекучей жидкости. На единицу длины вихря действует также сила трения, которая пропорциональна скорости вихря V_L :

$$\mathbf{F}_{\rm Tp} = -\eta \mathbf{V}_{\rm L} \,. \tag{2.6}$$

Уравнение, определяющее скорость вихря VL, можно получить из условия

$$\mathbf{F}_{\mathrm{m}} + \mathbf{F}_{\mathrm{Tp}} = \mathbf{0}. \tag{2.7}$$

Ниже мы перейдем к определению $\,V_L\,$ через заданные сверхпроводящие токи $\,j_s.$

3. Уравнение релаксации сверхпроводящих вихрей

Рассмотрим сверхпроводящий бесконечный цилиндр, помещенный во внешнее магнитное поле, направленное параллельно оси цилиндра. Используем цилиндрические координаты и ось Z направим параллельно оси цилиндра. Тогда вихрь, т.е. вектор **v**, будет направлен по оси Z. Если ввести цилиндрические координаты r и φ , то векторное уравнение (2.7), записанное в компонентах в направлениях r и φ , будет иметь следующий вид:

$$V_{Lz} = \kappa \left(V_{s\varphi} - V_{L\varphi} \right), \tag{3.1}$$

$$V_{L\varphi} = \kappa V_{Lr} , \qquad (3.2)$$

где введено обозначение

$$\kappa = \frac{en_s \Phi_0}{\eta c} \,. \tag{3.3}$$

Разрешив систему уравнений (3.1) и (3.2) относительно V_{Lr} и $V_{L\varphi}$, окончательно получим:

$$V_{L\varphi} = \frac{\kappa^2 / e n_s}{1 + \kappa^2} j_{s\varphi} , \qquad (3.4)$$

$$V_{Lr} = \frac{\kappa/en_s}{1+\kappa^2} j_{s\varphi}.$$
(3.5)

Заметим, что, если согласно (3.2) при больших коэффициентах трения, т.е. при малых *к*, основное движение вихрей радиальное, то при малых коэффициентах трения, т.е. при больших *к*, основное движение вихрей будет азимутальным.

Теперь перейдем к получению уравнения релаксации вихревой решетки. Запишем уравнения (2.2) и (2.4) в цилиндрических координатах, учитывая, что вектор **v** направлен по оси Z. Тогда имеем

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r M_{\varphi} \right) = n \Phi_0 r , \qquad (3.6)$$

И

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r n V_{Lr} \right). \tag{3.7}$$

Если продифференцировать обе стороны уравнения (3.6) по t и подставить $\partial n/\partial t$ из уравнения (3.7), окончательно получим

$$\frac{\partial}{\partial t}M_{\varphi} = -\Phi_0 n V_{Lr} \,. \tag{3.8}$$

Подставляя в уравнение (3.8) функцию V_{Lr} из уравнения (3.5) и заменяя $j_{s\phi}$ на

$$j_{s\varphi} = \frac{e^2 n_s}{mc} \left(M_{\varphi} - A_{\varphi} \right), \tag{3.9}$$

вместо уравнения (3.8) окончательно получим:

$$\frac{\partial M_{\varphi}}{\partial t} = -\frac{e\Phi_0 n_s}{mc} \frac{\kappa}{1+\kappa^2} \left(M_{\varphi} - A_{\varphi} \right).$$
(3.10)

Это и есть уравнение релаксации для средней магнитной индукции в сверхпроводнике второго рода. Оно имеет стационарное решение $\partial M_{\phi}/\partial t = 0$, что соответствует

$$A_{\varphi} = M_{\varphi} \,. \tag{3.11}$$

В этом случае зависимость M_{φ} от координаты будет иметь вид

$$M_{\varphi} = m_{\varphi}r, \qquad (3.12)$$

где m_{φ} = const. Тогда стационарное значение плотности вихрей определится из формулы (3.6) и будет иметь вид

$$n_0 = \frac{2m_\varphi}{\Phi_0} \,. \tag{3.13}$$

Среднее магнитное поле в сверхпроводнике, согласно (3.11)-(3.13), будет равно

$$\overline{B} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rA_{\varphi}) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 m_{\varphi}) = n_0 \Phi_0.$$
(3.14)

Это магнитное поле и есть $\overline{B} = f(H)$, что фактически определяется заданием внешнего магнитного поля H.

Автор выражает благодарность гранту CRDF/NFSAT №ARP2-3232-YE-04 за финансовую поддержку.

ЛИТЕРАТУРА

П. Де Жен. Сверхпроводимость металлов и сплавов. М., Мир, 1969.
 A.D.Sedrakian, D.M.Sedrakian. Astrophys. J., 447, 305 (1995).

ԵՐԿՐՈՐԴ ԿԱՐԳԻ ԳԵՐՀԱՂՈՐԴԻՉՆԵՐՈՒՄ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ՄՐՐԻԿՆԵՐԻ ԴԻՆԱՄԻԿ ՀԱՎԱՍԱՐՈՒՄՆԵՐԸ

Դ.Մ. ՍԵԴՐԱԿՅԱՆ

Մտացված է երկրորդ կարգի գերհաղորդիչներում մագնիսական քվանտային մրրիկների շարժման դինամիկայի հավասարումների համակագը, երբ T = 0: Այս հավասարումների համակարգից ստացված է մրրիկների խտության (կամ գերհաղորդիչ հոսանքի) ռելաքսացիայի հավասարումը և այն լուծված է ստացիոնար դեպքում։ Մրրիկների խտության ստացիոնար արժեքը համապատասխանում է $\mathbf{j}_{s} = 0$ պայմանին և որոշվում է միայն արտաքին մագնիսական դաշտի արժեքով։

EQUATIONS OF QUANTUM VORTEX DYNAMICS IN II TYPE SUPERCONDUCTORS

D.M. SEDRAKIAN

The equations of motion of magnetic quantum vortices in II type superconductors at T = 0 are derived. From these equations the equation of relaxation of the vortex density (or superconducting current) is obtained. It is shown that the stationary value of the vortex density corresponds to the condition $\mathbf{j}_s = 0$ and is determined only by the value of the external magnetic field.

УДК 539.184

КОГЕРЕНТНЫЕ СУПЕРПОЗИЦИОННЫЕ СОСТОЯНИЯ АТОМОВ ПРИ МНОГОФОТОННОМ ВОЗБУЖДЕНИИ В ЛАЗЕРНОМ И ОДНОРОДНОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ

Б.Р. АВЧЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 16 декабря 2005 г.)

Исследована возможность получения атомных когерентных суперпозиционных состояний с помощью многофотонного резонансного механизма в лазерных и однородных электрических полях. На основе резонансного приближения получены решения квазиклассических уравнений при многофотонном возбуждении водородоподобного атома в указанных полях, а также представлены некоторые численные расчеты для атома водорода.

1. Введение

Современные лазерные технологии позволяют получить электромагнитные поля, превышающие внутриатомные электрические поля. В этих условиях связанно-связанные, связанно-свободные переходы принимают существенно многофотонный характер. Возрастающий интерес к многофотонным "лазер-атом" взаимодействиям связан с возможностью генерации высоких гармоник и коротковолнового когерентного излучения по схеме связанный-свободный-связанный многофотонных вынужденных переходов [1-4]. С другой стороны, в сильных лазерных полях можно ожидать резонансного возбуждения атомов с помощью многофотонных процессов [5-8]. Как известно, если частота лазерного поля близка к собственной частоте двухуровневого атома, то соответствующими лазерными импульсами можно получить когерентное суперпозиционное состояние [9]. Последнее может привести к различным коллективным эффектам, таким как сверхизлучение, фотонное эхо и т.д. Но получение таких состояний проблематично, если собственная частота атома больше оптических частот. В этом случае задача сводится к многофотонному резонансному возбуждению, осуществление которого даст возможность получить многофотонные коллективные эффекты в высокочастотной области.

Исследование многофотонного резонансного возбуждения для двухуровневого атома вне рамок теории возмущений описано в работе [8], где показано, что даже при сильных лазерных полях атом не успевает многофотонно возбуждаться из-за конкурирующего процесса ионизации. Эта проблема была решена в работе [10], где предложена схема получения когерентных суперпозиционных состояний с помощью многофотонного взаимодействия между сильным лазерным полем и трехуровневым атомом. В рассмотренной схеме атом в возбужденном состоянии должен обладать средним дипольным моментом или же должны существовать возбужденные уровни, между которыми разрешен дипольный переход. В частности, показано, что в не очень сильных лазерных полях возможно многофотонное когерентное возбуждение водородоподобных атомов/ионов, благодаря наличию случайного вырождения по орбитальному моменту в кулоновском поле. Многофотонное возбуждение атомов, приводящее к возникновению когерентных суперпозиционных состояний, имеет важное значение в квантовой оптике и в ее приложениях. В частности, при определенных параметрах возбуждающей волны можно получить суперпозиционное состояние, в котором дипольный момент перехода имеет максимальное значение, и которое даст возможность осуществить коротковолновый сверхизлучательный лазер.

В данной работе рассматривается задача многофотонного резонансного возбуждения водородоподобных атомов в однородных электрических и лазерных полях. Роль дополнительного однородного электрического поля объясняется двумя причинами. Вопервых, оно снимает случайное вырождение по орбитальному моменту. Получается четырехуровневая система, в которой есть возможность получения более многообразных суперпозиционных состояний. Во-вторых, с помощью штарковского смещения в однородном электрическом поле можно изначально нерезонансные атомы перевести в резонанс с лазерным полем, что важно в тех случаях, когда с существующими гармониками лазерной частоты невозможно осуществить резонанс в данной области частот.

2. Основная модель и резонансное решение

В результате воздействия однородного электрического поля у водородоподобных атомов вырождение частично снимается. Энергетический уровень, соответствующий возбужденному состоянию, расщепляется на 3 уровня. Этим трем энергетическим уровням соответствуют 4 квантовых состояния атома. Обозначим атомные состояния через $|\eta\rangle$, где $\eta = 0,1,2,3,4$ указывает квантовый набор, описывающий данное состояние. Учитывая имеющуюся симметрию, задачу удобно решить в параболических координатах [11]. Атомные состояния в параболических координатах характеризуются $\eta = \{n, m, n_1\}$ квантовыми числами, где n — главное квантовое число, m — магнитное квантовое число, которые связаны следующим соотношением:

$$n = n_1 + n_2 + |m| + 1. \tag{1}$$

В этом случае n_1 , n_2 заменяют радиальные и орбитальные квантовые числа (согласно нерелятивистскому описанию, не учтены тонкая и сверхтонкая структуры атомных уровней). С учетом однородного электрического поля E_s правила отбора допускают переходы из основного состояния $|0\rangle$, $\eta = \{1,0,0\}$, $\varepsilon_0 = 0$ в возможные состояния $|1\rangle$, $\eta = \{2,0,1\}$, $\varepsilon_1 = 3/8 + 3E_s$; $|2\rangle$, $\eta = \{2,0,0\}$, $\varepsilon_2 = 3/8 - 3E_s$; $|3,4\rangle$, $\varepsilon_3 = 3/8$, $\eta = \{2,\pm1,0\}$ (энергия основного состояния выбрана как нулевая и использованы атомные единицы $e = m = \hbar = 1$, c = 137).

Таким образом, задача сводится к изучению четырехуровневого атома, находящегося в лазерном поле. Ее рассмотрим в полуклассическом случае и воспользуемся дипольным приближением. Будем считать, что электромагнитная волна линейно поляризована с несущей частотой ω и медленно меняющейся амплитудой $E_0(t)$. Предполагается, что длительность импульса τ меньше всех релаксационных времен системы. Уравнение Шредингера в энергетическом представлении для амплитуд вероятностей a_η записывается в следующем виде:

$$i\frac{d}{dt}a = (\hat{H}_0 + \hat{V})a, \qquad (2)$$

где $\hat{H}_0 = \varepsilon_\eta \delta_{\eta\nu}$ – гамильтониан свободной атомной системы (ε_η – энергия состояний, $\delta_{\eta\nu}$ – символ Кронекера) и

$$\hat{V} \equiv V_{\eta\nu} = -\Lambda_{\eta\nu} \cos \omega t \tag{3}$$

есть часть гамильтониана, связанная с взаимодействием. Здесь

$$\Lambda_{\eta\nu} = \langle \eta | \mathbf{er} | \nu \rangle E_0(t) \tag{4}$$

– амплитуда перехода, \mathbf{e} – вектор поляризации волны, а \mathbf{r} – радиус-вектор электрона. Не нарушая общности, мы можем вектор поляризации \mathbf{e} направить в плоскости *xz* параболических координат.

Для упрощения системы уравнений (2) и получения удобного с физической точки зрения вида для многофотонного резонансного приближения мы выполним следующее унитарное преобразование:

$$a_{\eta}(t) = b_{\eta}(t) \exp\left(-i\varepsilon_{\eta}t - i\int_{0}^{t} V_{\eta\eta}dt\right).$$
(5)

Новые амплитуды $b_{\eta}(t)$ удовлетворяют тем же начальным условиям $|b_{\eta}(0)|^2 = |a_{\eta}(0)|^2$. Теперь из (2) и (5) для амплитуд $b_{\eta}(t)$ получим следующую систему уравнений:

$$i\frac{db_0}{dt} = F(t)b_1 + G(t)b_2 + H(t)(b_3 + b_4), \quad i\frac{db_1}{dt} = F^{\dagger}(t)b_0 + K(t)(b_3 + b_4), \quad (6.1)$$

$$i\frac{db_2}{dt} = G^{\dagger}(t)b_0 + L(t)(b_3 + b_4), \quad i\frac{db_3}{dt} = H^{\dagger}(t)b_0 + K^{\dagger}(t)b_1 + L^{\dagger}(t)b_2, \quad (6.2)$$

$$i\frac{db_4}{dt} = H^{\dagger}(t)b_0 + K^{\dagger}(t)b_1 + L^{\dagger}(t)b_2, \qquad (6.3)$$

где

$$F(t) = V_{01}(t) \exp\left(i\left(\varepsilon_0 - \varepsilon_1\right)t - i\int_0^t V_{11}(t) dt\right), \quad G(t) = V_{02}(t) \exp\left(i\left(\varepsilon_0 - \varepsilon_2\right)t - i\int_0^t V_{22}(t) dt\right)$$
(7.1)
$$H(t) = V_{03}(t) \exp\left(i\left(\varepsilon_0 - \varepsilon_3\right)t\right) = V_{04}(t) \exp\left(i\left(\varepsilon_0 - \varepsilon_4\right)t\right),$$
(7.2)

$$K(t) = V_{13}(t) \exp\left(i(\varepsilon_1 - \varepsilon_3)t + i\int_0^t V_{11}(t)dt\right) = V_{14}(t) \exp\left(i(\varepsilon_1 - \varepsilon_4)t + i\int_0^t V_{11}(t)dt\right), \quad (7.3)$$
$$L(t) = V_{23}(t) \exp\left(i(\varepsilon_2 - \varepsilon_3)t + i\int_0^t V_{22}(t)dt\right) = V_{24}(t) \exp\left(i(\varepsilon_2 - \varepsilon_4)t + i\int_0^t V_{22}(t)dt\right). \quad (7.4)$$

Здесь F^{\dagger} означает комплексную сопряженную величины F. В этом представлении квазиэнергетические уровни $\varepsilon_{1,2,3,4} - s\omega$ (s = 1, 2, ...) близки к основному уровню и вероятности многофотонных переходов будут максимальны при условии

$$\varepsilon_0 - \varepsilon_i + n\omega \approx 0, \quad i = 1, 2, 3, 4, \quad n = 0, 1, 2, ...$$
 (8)

В этом случае функции F(t), G(t), K(t), L(t) можно представить в следующем виде:

$$F(t) = F_n + f(t), \quad G(t) = G_n + g(t), \quad K(t) = K_n + k(t), \quad L(t) = L_n + l(t),$$
(9)

где F_n , G_n , K_n , L_n – медленно меняющиеся части функций F(t), G(t), K(t), L(t):

$$F_n = -\omega \frac{\Lambda_{01}}{\Lambda_{11}} n J_n \left(\frac{\Lambda_{11}}{\omega} \right) \exp(i\delta_{1n}t), \quad G_n = -\omega \frac{\Lambda_{02}}{\Lambda_{22}} n J_n \left(\frac{\Lambda_{22}}{\omega} \right) \exp(i\delta_{2n}t), \quad (10.1)$$

$$K_n = (-1)^n \omega \frac{\Lambda_{13,4}}{\Lambda_{11}} n J_n \left(\frac{\Lambda_{11}}{\omega}\right) \exp\left(i(\delta_{3n,4n} - \delta_{1n})t\right), \qquad (10.2)$$

$$L_n = (-1)^n \omega \frac{\Lambda_{23,4}}{\Lambda_{22}} n J_n \left(\frac{\Lambda_{22}}{\omega} \right) \exp\left(i (\delta_{3n,4n} - \delta_{2n}) t \right).$$
(10.3)

В выражениях (9) быстро меняющиеся функции имеют следующий вид:

$$f(t) = -\omega \frac{\Lambda_{01}}{\Lambda_{11}} \exp(i\delta_{1n}t) \sum_{N \neq n, N = -\infty}^{\infty} N J_N\left(\frac{\Lambda_{11}}{\omega}\right) \exp(i(N-n)\omega t), \qquad (11.1)$$

$$g(t) = -\omega \frac{\Lambda_{02}}{\Lambda_{22}} \exp(i\delta_{2n}t) \sum_{N \neq n, N = -\infty}^{\infty} N J_N\left(\frac{\Lambda_{22}}{\omega}\right) \exp(i(N-n)\omega t), \qquad (11.2)$$

$$k(t) = (-1)^n \omega \frac{\Lambda_{13,4}}{\Lambda_{11}} \exp(i(\delta_{3,4n} - \delta_{1n})t) \sum_{N \neq n, N = -\infty}^{\infty} NJ_N\left(\frac{\Lambda_{11}}{\omega}\right) \exp(i(N - n)\omega t), \quad (11.3)$$

$$l(t) = (-1)^n \omega \frac{\Lambda_{23,4}}{\Lambda_{22}} \exp(i(\delta_{3,4n} - \delta_{2n})t) \sum_{N \neq n, N = -\infty}^{\infty} N J_N \left(\frac{\Lambda_{22}}{\omega}\right) \exp(i(N - n)\omega t), \quad (11.4)$$

где введены резонансные расстройки:

$$\delta_{1n} = \varepsilon_0 - \varepsilon_1 + n\omega, \qquad \delta_{2n} = \varepsilon_0 - \varepsilon_2 + n\omega, \qquad \delta_{3,4n} = \varepsilon_0 - \varepsilon_{3,4} + n\omega. \tag{12}$$

Вышеописанные соотношения можно получить, пользуясь известным разложением по функциям Бесселя

$$\exp(i\alpha\sin\omega t) = \sum_{N=-\infty}^{\infty} J_N(\alpha)\exp(iN\omega t) .$$
 (13)

Благодаря разделению функций (7.1-7.4) на медленные и быстрые части, амплитуды вероятностей можно представить в следующем виде:

$$b_{\eta}(t) = \overline{b}_{\eta}(t) + \beta_{\eta}(t), \quad (\eta = 0, 1, 2, 3, 4), \tag{14}$$

где $\overline{b}_{\eta}(t)$ – усредненная во времени функция от $b_{\eta}(t)$, а $\beta_{\eta}(t)$ – быстро осциллирующие функции. Подставляя (14) в систему (6.1-6.3), разделив быстро осциллирующие части и учитывая (9), получим для $\overline{b}_{\eta}(t)$ следующую систему уравнений:

$$i\frac{db_0}{bt} = F_n\overline{b_1} + G_n\overline{b_2} + \overline{f(t)\beta_1(t)} + \overline{g(t)\beta_2(t)} + \overline{H(t)\beta_3(t)} , \qquad (15.1)$$

$$i\frac{d\overline{b}_{1}}{dt} = F_{n}^{\dagger}\overline{b}_{0} + K_{n}\overline{b}_{3} + \overline{f^{\dagger}(t)\beta_{0}(t)} + \overline{k(t)\beta_{3}(t)} , \qquad (15.2)$$

$$i\frac{d\overline{b}_2}{dt} = G_n^{\dagger}\overline{b}_0 + L_n\overline{b}_3 + \overline{g^{\dagger}(t)\beta_0(t)} + \overline{l(t)\beta_3(t)} , \qquad (15.3)$$

$$i\frac{db_{3,4}}{bt} = K_{n}^{\dagger}\overline{b}_{1} + L_{n}^{\dagger}\overline{b}_{2} + \overline{k^{\dagger}(t)\beta_{1}(t)} + \overline{l^{\dagger}(t)\beta_{2}(t)} + \overline{H^{\dagger}(t)\beta_{0}(t)}, \qquad (15.4)$$

идля $\beta_{\eta}(t)$:

$$\beta_0 = -i \left(\overline{b_1}(t) \int_0^t f(t) dt + \overline{b_2}(t) \int_0^t g(t) dt + \overline{b_3}(t) \int_0^t H(t) dt \right),$$
(16.1)

$$\beta_{1} = -i \left(\overline{b_{0}}(t) \int_{0}^{t} f^{\dagger}(t) dt + \overline{b_{3}}(t) \int_{0}^{t} k^{\dagger}(t) dt \right), \quad \beta_{2} = -i \left(\overline{b_{0}}(t) \int_{0}^{t} g^{\dagger}(t) dt + \overline{b_{3}}(t) \int_{0}^{t} l^{\dagger}(t) dt \right), \quad (16.2)$$

$$\beta_{3} = -i \left(\overline{b_{1}}(t) \int_{0}^{t} k^{\dagger}(t) dt + \overline{b_{2}}(t) \int_{0}^{t} l^{\dagger}(t) dt + \overline{b_{3}}(t) \int_{0}^{t} H^{\dagger}(t) dt \right).$$
(16.3)

Подставляя выражения для $\beta_{\eta}(t)$ в систему (15.1-15.4), получим 4 линейных дифференциальных уравнения. В этой системе члены, обусловленные $\beta_{\eta}(t)$, описывают динамический эффект Штарка.

Полученная система (15.1-15.4) в общем случае, для произвольной амплитуды поля, решается численным методом. Но ее можно точно решить в случае постоянной амплитуды $E_0(t) = E_0$ (монохроматическая волна). В этом случае система (15.1-15.4) с помощью экспоненциального преобразования $\bar{b}_{\eta} \exp(i\delta_{\eta n})$ для амплитуд \bar{b}_{η} превратится в систему линейных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами, общее решение которой дается как суперпозиция четырех независимых решений:

$$\overline{b_{\eta}} = \sum_{\nu=0}^{3} C_{\nu} M_{\eta\nu} \exp(i(\lambda_{\nu} \delta_{\eta n})t), \qquad (17)$$

где коэффициенты C_{ν} — постоянные, определяющиеся из начальных условий, а коэффициенты λ_{ν} есть решения уравнений 4-ой степени

$$\det(A_{\mu\nu}) = 0. \tag{18}$$

Здесь $A_{\mu\nu}$ – характеристическая матрица для (15.1-15.4), а $M_{\eta\nu}$ – миноры этой матрицы.

Решения уравнений (15.1-15.4), из-за их громоздкости, мы здесь не приводим. Лишь добавим, что они получаются с учетом медленности изменения функции $\overline{b_n}$:

$$\left|\frac{db_{\eta}(t)}{dt}\right| \ll \left|b_{\eta}(t)\right| \cdot \boldsymbol{\omega} \,. \tag{19}$$

Воспользуясь неравенством (19), получим область применения полученных результатов:

$$\left(|F_{n}|,|G_{n}|,|K_{n}|,|L_{n}||\Delta_{L}|,|\delta_{1,2,3,4n}|\right) << \omega.$$
⁽²⁰⁾

3. Численные расчеты для атома водорода

Приведем несколько численных расчетов, потверждающих, на примере атома водорода, возможность получения в однородном электрическом поле многофотонного резонанса между когерентными суперпозиционными состояниями. Переходы, связанные с основным состоянием, в этом случае лежат в УФ области. Уже в этой области частот осуществление однофотонного резонанса с существующими лазерами проблематично, так что для получения когерентных суперпозиционных состояний определенный интерес представляет многофотонное резонансное возбуждение.

В случае однофотонного и двухфотонного резонанса влияние динамического эффекта Штарка не велико, но оно становится существенным при многофотонном резонансе. В таких случаях выбирается расстройка, компенсирующая динамический эффект Штарка. На рис.1 и 2 изображены временная эволюция населенностей когерентных суперпозиционных состояний в случае двухфотонного резонанса, соответственно, при отсутствии и наличии однородного электрического поля. С помощью статического эффекта Штарка становится возможным приведение одного из возбужденных уровней в резонанс (рис.2). В данном случае это – возбужденное состояние $|2\rangle$.



Рис.1. Населенность уровней атома как функция от времени (в единицах периода волны) в поле лазера KrF с длиной волны $\lambda = 248$ нм и интенсивностью $I \cong 6.7 \cdot 10^{12}$ Вт/см² ($E_{0x} = 0,01$ а.е., $E_{0z} = 0,01$ а.е.).



Рис.2. Населенность уровней атома как функции от времени (в единицах периода волны) в поле лазерного излучения, в присутствии статического электрического поля $E_s = 0.002344$ a.e. ($E_s = 0.19125$ эВ), при тех же параметрах лазера.

На рис.3 и 4 изображены временные эволюции населенностей когерентных суперпозиционных состояний в случае 7-фотонного резонанса, соответственно, при отсутствии и наличии однородного электрического поля. Здесь однородное смещение Штарка должно компенсироваться из-за большой фотонности, сделавшей существенным динамический эффект Штарка. В этом случае с помощью однородного постоянного поля приводится в резонанс возбужденное состояние |1>.



Рис.3. Населенность уровней атома как функция от времени (в единицах периода волны) в поле лазера Ті:Saphire с длиной волны $\lambda = 820$ нм и интенсивностью $I \cong 8.7 \cdot 10^{13}$ Вт/см² ($E_{0z} = 0.05$ а.е.).



Рис.4. Населенность уровней атома как функция от времени (в единицах периода волны) в поле лазерного излучения, в присутствии статического электрического поля $E_s = 0.003777$ а.е. ($E_s = 0.30822$ эВ), при тех же параметрах лазера.

Согласно рисункам, благодаря линейному Штарк-эффекту для атома водорода в постоянном однородном электрическом поле многофотонное взаимодействие атома с лазерным излучением происходит в условиях резонанса, что приводит к установлению когерентных суперпозиционных состояний. Рисунки показывают существование Рабиосцилляции при многофотонном возбуждении, обобщенная частота которых существенно нелинейным образом зависит от величины поля.

Из графиков видно, что, как и в случае однофотонного резонанса [9], в зависимости от параметров лазерных импульсов можно получить как когерентные суперпозиционные состояния, так и полную инверсию (*(*-импульсы). Известные эффекты, полученные для однофотонного резонанса [12-14], имеют место и в многофотонном случае.

Автор благодарен Г.К.Аветисяну за обсуждение результатов и постоянный интерес к

работе, а также Г.Ф.Мкртчяну за ценные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. N.B.Delone, V.P.Krainov. Multiphoton Processes in Atoms. Springer, Heidelberg, 1994.

2. M.Gavrila. Atoms in Intense Laser Fields. Academic Press, New York, 1992.

3. R.M.Potvliege, R.Shakeshaft. Atoms in Intense Laser Fields. Academic Press, New York, 1992.

- 4. M.H.Mittleman. Introduction to the Theory of Laser-Atom Interactions. Plenum, New York, 1993.
- 5. V.P.Krainov. JETP, 70, 1197 (1976).

6. A.S.Shumovsky, E.I.Aliskenderov, Fam Le Kien. J. Phys. A, 18, L1031 (1985).

7. A.S.Shumovsky, E.I.Aliskenderov, Fam Le Kien. J. Phys. A, 19, 3607 (1986).

8. R.E.Duvall, E.J.Valeo, C.R.Oberman. Phys. Rev. A, 37, 4685 (1988).

9. L.Allen, J.H.Eberly. Optical Resonance and Two Level Atoms. Wiley-Interscience, New York, 1975.

10. H.K.Avetissian, G.F.Mkrtchian. Phys. Rev. A, 66, 033403 (2002).

11. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика, т.З. М., Наука, 1989.

12. K.Bergmann, H.Theuer, B.W.Shore. Rev. Mod. Phys., 70, 1003 (1998).

13. K.-J.Boller, A.Imamoglu, S.E.Harris. Phys. Rev. Lett., 66, 2593 (1991).

14. D.F.Phillips, A.Fleischhauer, A.Mair, R.L.Walsworth, M.D.Lukin. Phys. Rev. Lett., 86, 783 (2001).

ԱՏՈՄՆԵՐԻ ԿՈՀԵՐԵՆՏ ՍՈՒՊԵՐՊՈԶԻՑԻՈՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԸ ԼԱԶԵՐԱՅԻՆ ԵՎ ՀԱՄԱՍԵՌ ԷԼԵԿՏՐԱԿԱՆ ԴԱՇՏԵՐՈՒՄ ԲԱԶՄԱՖՈՏՈՆ ԳՐԳՌՄԱՆ ՄԻՋՈՑՈՎ

Բ.Ռ. ԱՎՉՅԱՆ

Ուսումնասիրված է ատոմային կոհերենտ սուպերպոզիցիոն վիձակների ստացումը բազմաֆոտոն մեխանիզմով լազերային և համասեռ էլեկտրական դաշտերում։ Ռեզոնանսային մոտավորության հիման վրա ստացվել են հիմնական հավասարումներն ու նրանց լուծումները, ինչպես նաև ներկայացված են թվային հաշվարկներ ջրածնի ատոմի համար։

COHERENT SUPERPOSITION STATES VIA MULTIPHOTON EXCITATION OF ATOMS IN THE LASER AND UNIFORM ELECTRIC FIELDS

B.R. AVCHYAN

The generation of atomic coherent superposition states via multiphoton resonant mechanism in the laser and uniform electric fields is studied. Based on the resonant approximation the main equations and their solutions are obtained. Numerical calculations for a hydrogen atom are also presented.

УДК 531.19

ПЛОТНОСТЬ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НУЛЕЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ СУММЫ ДЛЯ ОДНОМЕРНОЙ МОДЕЛИ ПОТТСА

К.Г. САРГСЯН, Л.Н. АНАНИКЯН

Ереванский физический институт

(Поступила в редакцию 17 января 2006 г.)

На основе трансфер-матричного метода разработан общий подход для получения нулей статистической суммы в случае одномерной модели Поттса с числом состояний Q позволяющий получить распределения нулей Янга–Ли, Фишера и хроматических нулей. Рассмотрены нули для Q < 1. Приведена общая формула плотности распределения нулей статистической суммы и на ее основе проведен анализ Янг–Ли, Фишеровских и хроматических сингулярностей. Получены соответствующие им критические индексы.

1. Введение

Термодинамические свойства физической системы могут быть описаны с помощью статистической суммы. С появлением статистической механики, одним из ключевых вопросов являлась проблема образования сингулярностей в термодинамическом пределе $(N \rightarrow \infty)$ при фазовых переходах. Один из подходов был дан в работах Ли и Янга в 1952 г. [1]. В них рассмотрена статистическая сумма модели Изинга как полином от активности $(\mu = e^{\beta H})$ и исследовано распределение нулей полинома в комплексной плоскости. Было показано, что нули Янга–Ли статистической суммы для модели Изинга произвольной размерности лежат на единичной окружности и фазовый переход в системе происходит в случае, когда непрерывное распределение нулей статистической суммы пересекает реальную ось в термодинамическом пределе. В дальнейшем Фишер рассмотрел также нули статистической суммы от комплексной температуры (нули Фишера) [2].

Знание распределения нулей статистической суммы, полностью задающей критическое поведение системы, играет важную роль. Интересно их рассмотрение на такой простой и эффективной в исследованиях модели, как одномерная модель Поттса с числом состояний Q[3]:

$$H = -J\sum_{i=1}^{N} \delta(\sigma_i, \sigma_{i+1}) - H\sum_{i=1}^{N} \delta(\sigma_i, q) .$$
⁽¹⁾

Одномерная модель Поттса при Q < 1 описывает такие реальные системы и процессы, как процесс гелеобразования и вулканизации в разветвленных полимерах [4], задачу перколяции в пределе $Q \rightarrow 1$ [5,6], резисторную сеть, а также древовидную перколяцию при

Q = 0 [6] и разреженные спиновые стекла в случае Q = 1/2 [7].

В данной статье рассмотрены нули Янга–Ли и Фишера при Q < 1, а также хроматические нули от комплексного хроматического числа Q[8], изучены соответствующие сингулярности, приведены граничные точки распределения нулей статистической суммы и критические индексы σ, μ, ν .

2. Статистическая сумма и собственные значения трансфер-матрицы

Нули статистической суммы для этой модели уже были частично рассмотрены в разных работах. Динамическим подходом распределения нулей статистической суммы рассчитаны в [9]. Трансфер-матричный метод, используемый и в данной работе, был применен для разных частных случаев [10]. Нули статистической суммы исследовались также с применением метода фейнмановских диаграмм [11].

Как известно, используя трансфер-матричный метод, статистическую сумму системы можно представить в виде

$$Z_N = \operatorname{Tr} V^N.$$

Трансфер-матрица для одномерной модели Поттса имеет вид

$$V_{i,j} = \exp\left[\beta J \delta(i,j) + \beta H \frac{(\delta(i,q) + \delta(j,q))}{2}\right].$$
(3)

Ненулевые собственные значения λ_i трансфер-матрицы задаются следующим образом:

$$\lambda_{\pm} = (A \pm iB)/2$$
, где $A = a(1+x+Q-2)$ и $B = -i\sqrt{[a(1-x)+Q-2]^2 + 4(Q-1)x}$,
 $\lambda_0 = a-1$, $a = e^{\beta J}$, $x = e^{\beta H}$. (4)

Статистическую сумму теперь можно представить в виде

$$Z_{N} = \lambda_{+}^{N} + \lambda_{-}^{N} + (Q - 2)\lambda_{0}^{N} .$$
(5)

Данное выражение легко обобщить на рациональные *Q*. Те же величины для собственных значений получаются при аналогичных расчетах в формализме с непрерывными *Q*[11].

Легко заметить, что есть всего две возможности для λ_i . Во-первых, это случай, когда $|\lambda_+| = |\lambda_-| > |\lambda_0|$ (а), и в статистической сумме сокращается третий член в термодинамическом пределе. А также ситуация, когда $|\lambda_-| = |\lambda_0| > |\lambda_+|$ или $|\lambda_+| = |\lambda_0| > |\lambda_-|$ (б), и соответственно, сокращается первый или второй член в термодинамическом пределе.

3. Нули Янга-Ли

Рассмотрим распределение нулей статистической суммы на примере нулей Янга–Ли, в обоих случаях (а),(б). В первом случае видно, что статистическая сумма будет равна нулю, если собственные значения трансфер-матрицы связаны соотношением

$$\lambda_{+} = \lambda_{-} e^{i\varphi}, \quad \text{где} \qquad \varphi = \frac{(2p+1)\pi}{N}, \qquad p = 0, 1, 2, ..., N-1.$$
 (6)

Отсюда следует уравнение для нулей Янга–Ли относительно *х* :

$$a^{2}e^{i\varphi}x^{2} + [(Q-1)(e^{i\varphi}+1)^{2} - a(a+Q-2)(e^{2i\varphi}+1)]x + (a+Q-2)^{2}e^{i\varphi} = 0.$$
(7)

Для второго случая можно записать

$$\frac{\lambda_{+}}{\lambda_{0}} = (2-Q)^{1/N} \exp(i\phi_{k}) = b, \quad \text{где} \qquad \phi_{k} = \frac{2\pi k}{N}, \qquad k = 0, 1, 2, ..., N-1.$$
(8)

Отсюда легко получить уравнение для *х*, задающее нули Янга–Ли:

$$[a^{2} + a(Q-2) - ab(a-1) - Q + 1]x + b(a-1)(b(a-1) - a - Q + 2) = 0.$$
 (9)

Из этих двух уравнений, с учетом указанных условий их применения, получаем нули Янга– Ли при любых параметрах *a* и *x* (пример такого распределения приведен на рис.1).



Рис.1. Нули Янга–Ли при параметрах *a* = 3, *Q* = 1/10, *N* = 100.

Для рассмотрения плотности распределения нулей *x* на кривой мы в общем случае получаем следующее выражение:

$$g(\psi) = \frac{1}{2\pi \sqrt{\left(\frac{\partial(\operatorname{Re} x)}{\partial \psi}\right)^2 + \left(\frac{\partial(\operatorname{Im} x)}{\partial \psi}\right)^2}},$$
(10)

где $\psi = \varphi$ или ϕ в зависимости от конкретного случая. Функция $g(\psi)$ нормирована условием

$$\int_{0}^{2\pi} g(\psi) \, d\psi = 1 \,. \tag{11}$$

Соответствующие сингулярности плотности распределения возникают на концах окружности, задаваемой уравнениями (5). В случае окружности плотность нулей задается более простым соотношением $g(\psi) = (1/2\pi) \cdot (\partial \psi / \partial \theta)$, где θ есть угол, описывающий окружность в полярных координатах.

Расчет нулей Янга–Ли для случая сингулярности $g(\psi) \propto |\psi - \psi_0|^{\sigma}$ дает соотношение

$$g(\psi \to \psi_0) \propto \frac{1}{\sqrt{x(\psi) - x(\psi_0)}},\tag{12}$$

где ψ_0 задает граничные точки на окружности (5):

$$x^{\pm}(\psi_0) = x^{\pm}(0) = \frac{(2 - 2a + a^2 - 2Q + Qa \pm 2\sqrt{(1 - a)(Q - 1)(a + Q - 1)})}{a^2}.$$
 (13)

Таким образом, критический индекс, соответствующий сингулярности Янга–Ли, принимает значение $\sigma = -1$. При Q < 1 критический индекс имеет такое же значение, что и в случае Q > 1.

4. Нули Фишера

В случае нулей Фишера можно провести аналогичные вычисления. Будем опять рассматривать оба возможных случая (а) и (б) для собственных значений.

В первом случае (а) получаем для распределения нулей у следующее уравнение:

$$y^{2}(e^{i\varphi}(4+Q^{2}+2Q(-2+x)-2x)+(1+e^{2i\varphi})(-1+Q)x) - -y(-2+Q)(-2e^{i\varphi}+x+e^{2i\varphi}x)-(x+e^{2i\varphi}x-e^{i\varphi}(1+x)) = 0.$$
(14)

Во втором случае (б):

$$y^{2}(b^{2} + b(-2 + Q) + x - Qx) + y(-2b^{2} + (2 - Q)x + b(3 - Q + x)) + (b - 1)(b - x) = 0.$$
 (15)

Из этих двух уравнений, учитывая области их применимости, получаются распределения нулей Фишера при любых параметрах *x*, *Q* и *N*(см. рис.2).



Рис.2. Нули Фишера при *Q* = 1/2, *x* = 5/2, *N* = 100.

Используя соотношения (10), (11) для плотности распределения нулей на кривой, заменяя *x* на *y* и изучая поведение этой величины вблизи граничных точек, получаем:

$$g(\psi \to \psi_0) \propto \frac{1}{\sqrt{y(\psi) - y(\psi_0)}},$$
(16)

где граничные точки описываются уравнением (14):

$$y^{\pm}(\psi_0) = y^{\pm}(0) = \frac{(Q-2)(x-1) - 2\sqrt{(1-Q)(x-1)^2 x}}{(Q-2)^2 - 4(1+Q)x}.$$
 (17)

Критический индекс, соответствующий Фишеровской сингулярности $g(\psi) \propto |\psi - \psi_0|^{\mu}$, принимает значение $\mu = -1$. Как и в случае нулей Янга–Ли, критический индекс при Q < 1 остается таким же, как и для Q > 1.

5. Хроматические нули

Проведем сходное расссмотрение и в случае хроматических нулей *Q*. Снова выделим два случая соотношений между собственными значениями трансфер-матрицы.

В первом случае (a), полностью повторяя рассуждения для предыдущих типов нулей, получаем уравнение:

$$e^{i\varphi}Q^{2} - Q[4(a-1)x + (a-1)e^{2i\varphi}x - 2e^{i\varphi}(-2+a+x)] - [(a-1)^{2}x + (a-1)^{2}e^{2i\varphi}x + e^{i\varphi}\{(4a-4+2x-a^{2}(1+x^{2})\}] = 0.$$
(18)

Для второго случая (б):

$$Q(1-a)(b-x) + (a-1)((a-1)b^{2} + (a-1)x - b(-2+a+ax)) = 0.$$
 (19)

С учетом области применимости уравнений получаем распределения для любых параметров *a*, *x* и *N*. Пример такого распределения приведен на рис.3.



Рис.3. Хроматические нули при *x* = 3, *a* = 1/5, *N* = 100.

Для плотности распределения хроматических нулей на кривой рассуждаем так же, как и в случае нулей Фишера. Хроматическая сингулярность в данном случае возникает для граничных точек окружностей, задаваемых уравнениями (16), (17).

Изучая поведение плотности хроматических нулей при приближении к граничным точкам, получаем как и в предыдущих случаях:

$$g(\psi \to \psi_0) \propto \frac{1}{\sqrt{Q(\psi) - Q(\psi_0)}} \,. \tag{20}$$

Граничные точки можно найти из уравнения окружности (18):

$$Q^{\pm}(\psi_0) = Q^{\pm}(0) = (a-2)(x-1) \pm 2\sqrt{(1-a)(x-1)x} .$$
⁽²¹⁾

Критический индекс, соответствующий хроматической сингулярности $g(\psi) \propto |\psi - \psi_0|^{\nu}$, принимает значение $\nu = -1$. Как и в предыдущих типах нулей статистической суммы, критический индекс при Q < 1 остается таким же, как и для Q > 1.

6. Заключение

В данной работе изложен общий метод нахождения нулей Янга–Ли, Фишера и хроматических нулей статистической суммы одномерной модели Поттса трансферматричным методом, при любых возможных параметрах. Также приведено соотношение для функции распределения плотности нулей статистической суммы на кривой и на ее основе изучен нерасмотренный до этого случай Q < 1. Получены критические индексы для соответствующих сингулярностей. Данный подход позволит в дальнейшем исследовать нули Фишера, сингулярности Янга–Ли и Фишера, а также получить критические индексы для одномерных моделей Блюме–Капела и Блюме–Эвери–Гриффитса [12]. Трансфер-матричный подход также будет применен для исследования нулей статистической суммы и критического поведения модели Поттса на треугольной зигзаг-решетке, описывающей полипептиды и белки. Ранее эта модель была рассмотрена динамическим методом с многомерным отображением [13].

Авторы благодарят Н.С.Ананикяна, Н.Я.Иванова и Р.Артузо за постановку задачи и многочисленные полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. C.N.Yang, T.D.Lee. Phys. Rev., 87, 404 (1952), T.D.Lee, C.N.Yang. Phys. Rev., 87, 410 (1952).
- M.E.Fisher, in Lectures in Theoretical Physics, edited by W.E. Brittin.University of Colorado Press, Boulder, vol.7c, p.1, 1965.
- 3. R.B.Potts. Proc. Camb. Philos. Soc., 48, 106 (1952); F.Y. Wu. Rev. Mod. Phys., 54, 235 (1982).
- 4. T.C.Lubensky, J.Isaacson. Phys. Rev. Lett., 41, 829 (1978).
- 5. P.W.Kasteleyn, C.M.Fortuin. J. Phys. Soc. Jpn. Suppl., 26, 11 (1969); C.M.Fortuin, P.W.Kasteleyn. Physica A, 57, 536 (1972).
- 6. M.J. Stephen. Phys. Lett. A, 56, 149 (1976).
- 7. A. Aharony. J. Phys. C, 11, L457 (1978).
- S.-Y.Kim, R.J.Creswick. Phys. Rev. E, 63, 066107 (2001); S.-C.Chang, J.Salas, R.Shrock. J. Stat. Phys., 107, 1207 (2002); J.Salas, A.D.Sokal. J. Stat. Phys., 104, 609 (2001); K.Appel, W.Haken. Contemp. Math., 98, 1 (1989); R.Shrock, S-H.Tsai. Phys. Rev. E, 56 4111 (1997); R.Shrock, S-H.Tsai. Physica A, 275 429 (2000); N.L.Biggs, R.Shrock. J. Phys. A., 32 L489 (1999); Z.Glumac, K.Uzelac. Physica A, 310, 91 (2002).
- R.G.Ghulghazaryan, N.S.Ananikian. J. Phys. A., 36, 6297 (2003); R.G.Ghulghazaryan, N.S.Ananikian, P.M.A.Sloot. Phys. Rev. E, 66, 046110 (2002); N.S.Ananikian, R.G.Ghulghazaryan. J. Comp. Methods in Sciences and Engineering, 2, 75 (2002); A.E.Alakhverdian., N.S.Ananikian, S.K.Dallakian. Phys. Rev. E, 57, 2452 (1998); J.L.Monroe. Phys. Lett. A, 188, 80 (1994).
- Z.Glumac, K.Uzelac. J. Phys. A, 27 7709, (1994); S.-Y.Kim. Journal of the Korean Society, 44, 495 (2004); S.-Y.Kim. Nucl. Phys. B, 705 [FS], 504 (2005); S.-Y.Kim. Phys. Rev. Lett., 93, 130604 (2004); R.J.Creswick, S.-Y.Kim. Phys. Rev. E, 56, 2418 (1997); S.-Y.Kim. Phys. Rev. E, 70, 016110 (2004); G.Bhanot, J.Lacki. J. Stat. Phys., 71, 259 (1993); S.-Y.Kim, R.J.Creswick. Phys. Rev. Lett., 82, 3924 (1999); S.-Y.Kim. Nucl. Phys. B, 637, 409 (2002).

- L.A.F.Almeida, D.Dalmazi. J. Phys. A, 38, 6863 (2005); M.Staudacher. Nucl. Phys. B, 336, 349 (1990);
 W.Janke, D.A.Johnston, M.Stathakopoulos. Nucl. Phys. B, 614, 494 (2001); L.C.de Albuquerque, N.A.Alves,
 D.Dalmazi. Nucl. Phys. B, 580, 739 (2000); V.A.Kazakov, Phys. Lett. A, 119, 140 (1986); D.Boulatov,
 V.A.Kazakov. Phys. Lett. B, 186, 379 (1987); B.P.Dolan, W.Janke, D.A.Johnston, M.Stathakopoulos. J. Phys. A,
 34, 6211 (2001); D.A.Johnston. J. Phys. A, 31, 5641 (1998); B.Dolan. Phys. Rev. E, 52, 4512 (1995).
- M.Blume, V.J.Emery, R.B.Griffiths. Phys. Rev. B, 4, 1071 (1971); A.Z.Akheyan., N.S.Ananikian. J. Phys. A, 29, 721 (1996); N.S.Ananikian et al. JETP Lett., 59, 71 (1994); N.S.Ananikian et al. Physica A, 172, 391 (1991); A.R.Avakian, N.S.Ananikian, N.Sh.Izmailyan. Phys. Lett. A, 150, 163 (1990); N.S.Ananikian, et al. Solid State Phys. (Soviet), 34, 3448 (1992).
- 13. N.S.Ananikian, L.N.Ananikyan. World Scientific, ed. by S.Rahvar, N.Sadooghi, F.Shojai, 21, (2005).

ՎԻՃԱԿԱԳՐԱԿԱՆ ԳՈՒՄԱՐԻ ԶՐՈՆԵՐԻ ԲԱՇԾՄԱՆ ԽՏՈՒԹՅՈՒՆԸ ՓՈԹՍԻ ՄԻԱՉԱՓ ՄՈԴԵԼՈՒՄ

Կ.Գ. ՍԱՐԳՍՅԱՆ, Լ.Ն. ԱՆԱՆԻԿՅԱՆ

Q վիձակների թվով Փոթսի միաչափ մոդելի վիձակագրական գումարի զրոների ստացման համար տրանսֆեր-մատրիցական մեթոդի հիման վրա մշակված է ընդհանուր մոտեցում, որը թույլ է տալիս ստանալ Յանգ-Լիի, Ֆիշերի և քրոմատիկ զրոների բաշխումները։ Դիտարկված են Q<1 դեպքի զրոները։ Բերված է վիձակագրական գումարի զրոների բաշխման խտության ընդհանուր բանաձև, և նրա հիման վրա կատարված է Յանգ-Լիի, Ֆիշերի և քրոմատիկ եզակիությունների վերլուծություն։ Մտացված են համապատասխան կրիտիկական ինդեքսները։

DISTRIBUTION DENSITY OF PARTITION FUNCTION ZEROS FOR A ONE-DIMENSIONAL POTTS MODEL

K.G. SARGSYAN, L.N. ANANIKIAN

Using transfer-matrix approach, we propose a general approach to obtain one-dimensional Q-State Potts model partition function zeros. We give examples of calculated distributions for Q < 1 and derive a formula for the zeros distribution density. Also the Yang–Lee, Fisher and chromatic edge singularities are analyzed, using our formula, and their critical exponents are derived.

УДК 548.0

НАКЛОННОЕ ПРОХОЖДЕНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНЫ ЧЕРЕЗ СЛОИ С ОДНОРОДНОЙ И НЕОДНОРОДНОЙ СПИРАЛЬНОЙ СТРУКТУРОЙ

О.С. ЕРИЦЯН, А.А. ПАПОЯН, О.М. АРАКЕЛЯН, К.В. ПАПОЯН, О.В. ПИКИЧЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 29 апреля 2005 г.)

Методом сложения слоев получено точное решение задачи наклонного прохождения электромагнитной волны через слой со спиральной структурой при постоянном и переменном в пространстве шаге спирали. Рассмотрены поляризационные и энергетические характеристики.

1. Введение

Взаимодействие электромагнитной волны со средами со спиральной структурой, на которое было уделено большое внимание в связи с интересом к оптике холестерических жидких кристаллов [1(3], не перестает быть актуальной задачей. Это связано, в частности, с отсутствием точного решения при наклонном падении. Последний случай рассматривался в [1] и, при наличии магнитооптической активности, в [4]. Задача в [4], как и в [1], решена хотя и приближенно, но аналитически. Представляет интерес точное решение, могущее заполнить отмеченный выше пробел в теории оптических свойств спиральных сред. Оно получено в [5] численным методом на основании метода сложения слоев Амбарцумяна [6], первоначально сформулированного для интенсивностей, а в дальнейшем - для полей [7]. В настоящей работе, в отличие от [5], где изучены только энергетические характеристики при наклонном прохождении (этот вопрос рассмотрен здесь более обстоятельно, чем в [5]), рассматриваются также поляризационные характеристики и неоднородный твист-слой, для которого неприменим дифракционный подход даже приближенно.

2. Метод сложения слоев

Спиральную структуру представим как сложенные друг на друга тонкие анизотропные пластинки из одноосного кристалла, ось которого лежит в плоскости пластинок. При этом каждая из пластинок повернута относительно предыдущей вокруг своей нормали (ось z) на угол $d\psi$; при $d\psi/dz = \text{const}$ имеем спиральную структуру с

постоянным шагом спирали. Направление оси z будем называть направлением "слева направо". Пусть внешняя волна падает на стопку слева, причем плоскость падения совпадает с плоскостью xz. Обозначим тангенциальную компоненту волнового вектора падающей волны через k_x , которая одинакова для всех волн во всех пластинках, из-за независимости диэлектрической проницаемости от координаты x ($\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}(z)$). Введем амплитудные матрицы отражения и прохождения \hat{R}_a , \hat{T}_a *а*-ой пластинки при падении на нее волны слева. Введем также аналогичные матрицы \hat{R}_a , \hat{T}_a при падении волны справа, при том же значении k_x тангенциальной компоненты волнового вектора. С помощью матриц для двух пластинок построим матрицы \hat{R}_{a+b} , \hat{T}_{a+b} для пары пластинок a и b. Матрицы \hat{R}_{a+b} и \hat{T}_{a+b} выражаются через матрицы для отдельных пластинок следующим образом [6]:

$$\widehat{R}_{a+b} = \widehat{R}_a + \widetilde{\widehat{T}}_a \widehat{R}_b (\widehat{I} - \widetilde{\widehat{R}}_a \widehat{R}_b)^{-1} \widehat{T}_a, \qquad \widehat{T}_{a+b} = \widehat{T}_b (\widehat{I} - \widetilde{\widehat{R}}_a \widehat{R}_b)^{-1} \widehat{T}_a, \tag{1}$$

где \widehat{I} – единичная двумерная матрица.

Матрицы \hat{R}_{a+b} и \hat{T}_{a+b} выражаются следующими формулами:

$$\widetilde{\hat{R}}_{a+b} = \widetilde{\hat{R}}_b + \widehat{T}_b \widetilde{\hat{R}}_a (\widehat{I} - \widehat{R}_b \widetilde{\hat{R}}_a)^{-1} \widetilde{\hat{T}}_b, \quad \widetilde{\hat{T}}_{a+b} = \widetilde{\hat{T}}_a (\widehat{I} - \widehat{R}_b \widetilde{\hat{R}}_a)^{-1} \widetilde{\hat{T}}_b.$$
(1a)

Расчет прохождения через спиральную структуру выполнен нами на основании формул (1), (1а) путем их последовательного применения по мере добавления новых пластинок в стопку, которая рассматривается как пластинка "a", а вновь добавляемая – как пластинка "b".

3. Наклонное прохождение через слой со спиральной структурой

а) Энергетические характеристики

На рис.1 представлены частотные зависимости энергетического коэффициента отражения R при разных углах падения. Падающая волна (плоскость падения – плоскость *хz*) имеет эллиптическую поляризацию с компонентами амплитуды электрического поля $E_x = 1$, $E_y = i$. Шаг спирали $\sigma = 0,42$ мкм, компонента тензора диэлектрической проницаемости в направлении директора $\varepsilon_{\parallel} = 2,29$, в направлениях, перпендикулярных к директору, ($\varepsilon_{\perp} = 2,143$, толщина спирального слоя $d = 100 \sigma$.

При отклонении от нормального падения брэгговский столик искажается, а общий уровень осцилляций растет. С увеличением угла падения наблюдается смещение области дифракционного отражения в сторону больших частот. Объяснение этому явлению дано в [5].



Рис.1. Частотная зависимость энергетического коэффициента отражения от среды с параметрами: $\varepsilon_{\parallel} = 2,29$, $\varepsilon_{\perp} = 2,143$, толщина слоя $d=100 \sigma$, шаг спирали, $\sigma = 0,42$ мкм, угол падения $\theta = 0^{\circ}$ (a), $\theta = 30^{\circ}$ (b), $\theta = 45^{\circ}$ (c), $\theta = 75^{\circ}$ (d).

б) Поляризационные характеристики

На рис.2 приведены зависимости эллиптичности поляризации отраженной (**3**г) и прошедшей (**э**t) волн от эллиптичности поляризации падающей волны при нормальном падении. В падающей волне $E_y = 1$, $E_x = i \cdot e$; по оси абсцисс отложена величина *e*. На рис.3 приведены те же зависимости при угле падения $\theta = 75^{\circ}$. В падающей волне $E_s = 1$, $E_p = i \cdot e / \cos \theta$; по оси абсцисс отложена величина *e*.



Рис.2. Зависимость эллиптичности поляризации отраженной (а) и прошедшей (b) волны от эллиптичности поляризации падающей волны при нормальном падении. Параметры среды: $\varepsilon_{\parallel} = 2,29$, $\varepsilon_{\perp} = 2,143$, толщина слоя d = 0,42 мкм, шаг спирали $\sigma = 0,42$ мкм, частота волны $\omega = 3 \cdot 10^{15}$ Гц.



Рис.3. То же, что и на рис.2, но при угле падения $\theta = 75^{\circ}$.

Ход кривых существенно меняется при переходе от случая нормального падения к наклонному. Замечается уменьшение минимальных значений **э**г и **э**t при переходе к наклонному падению.

4. Прохождение через неоднородный твист-слой

Для случая толстых слоев дифракционная теория может быть применена к случаю наклонного падения, но, как было отмечено выше, она применима только приближенно. В случае, когда В слое не содержится так много шагов спирали, чтобы дифракционное отражение сформировалось (условие формирования $\Delta \varepsilon (d / \sigma) >> 1$, где $\Delta \varepsilon$ - анизотропия тензора ε_{ii} , d - толщина слоя, σ - шаг спирали), дифракционная теория не может быть применена вообще. Метод сложения слоев применим также к этому случаю. На рис.4 и 5 приведены кривые частотной зависимости коэффициента отражения спирального слоя со следующими параметрами: дифференциальный шаг спирали на левой границе слоя имеет значение 7,7 мкм и линейно меняется, принимая на правой границе значение, равное 0,42 мкм, d = 0,42 мкм, $\varepsilon_{\parallel} = 2,1,=2,1, \epsilon_{\perp} = 1,5,1,5$. Компоненты поля падающей волны заданы следующим образом: $E_y = 0$, $E_x = 1$. Углы падения на рис.4 и 5 соответственно равны 0° и 30°. Как и в случае толстых слоев, у твист-слоя также наблюдается смещение области дифракционного отражения в сторону больших частот при увеличении угла падения. Наблюдается также снижение максимумов при переходе от нормального падения к наклонному.



Рис.4. Частотная зависимость энергетического коэффициента отражения от твистслоя при нормальном падении. Параметры твист-слоя: ε_{\parallel} =2,1, ε_{\perp} =1,5, дифференциальный шаг спирали меняется от 7,7 мкм до 0,42 мкм, толщина слоя d = 0,42 мкм.

Приведенные выше результаты могут служить основой для постановки новых экспериментов с более детальным сопоставлением с результатами расчетов на основе метода сложения слоев.

ЛИТЕРАТУРА

1. В.А. Беляков, А.С. Сонин. Оптика холестерических жидких кристаллов. М., Наука, 1982.

- 2. П.Де Жен. Физика жидких кристаллов. М., Мир, 1977.
- 3. С.Чандрасекар. Жидкие кристаллы. М., Мир, 1980.
- 4. В.А.Киеня, И.В.Семченко. Кристаллография. 39, 514 (1994).
- 5. О.С.Ерицян, А.А.Папоян, О.М.Аракелян. Изв. НАН Армении, 41, 281 (2006).
- 6. В.А.Амбарцумян. Изв. АН Арм. ССР, Естественные науки, 1-2, 31 (1944).

7. **О.В.Пикичян.** Сообщения Бюраканской обсерватории, **B LV**, 5 (1984).

ԷԼԵԿՏՐԱՄԱԳՆԻՍԱԿԱՆ ԱԼԻՔԻ ԹԵՔ ԱՆՑՈՒՄԸ ՀԱՄԱՍԵՌ ԵՎ ԱՆՀԱՄԱՍԵՌ ՊԱՐՈՒՐԱՅԻՆ ԿԱՌՈՒՑՎԱԾՔՈՎ ՄԻՋԱՎԱՅՐԻ ՇԵՐՏՈՎ

Շերտերի գումարման մեթոդով Ճշգրիտ լուծված է էլեկտրամագնիսական ալիքի թեք անցման խնդիրը պարուրային կառուցվածքով շերտի միջով՝ պարույրի հաստատուն և փոփոխական քայլի դեպքում։

OBLIQUE TRANSMISSION OF ELECTROMAGNETIC WAVE THROUGH HOMOGENEOUS AND INHOMOGENEOUS HELICAL LAYERS

H.S. ERITSYAN, A.A. PAPOYAN, H.M. ARAKELYAN, K.V. PAPOYAN, H.V. PIKICHYAN

The problem of electromagnetic wave transmission through a helical homogeneous and inhomogeneous layers for oblique incidence is solved.

УДК 548.0

НАКЛОННОЕ ПРОХОЖДЕНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНЫ ЧЕРЕЗ СЛОИ С ОДНОРОДНОЙ И НЕОДНОРОДНОЙ СПИРАЛЬНОЙ СТРУКТУРОЙ

О.С. ЕРИЦЯН, А.А. ПАПОЯН, О.М. АРАКЕЛЯН, К.В. ПАПОЯН, О.В. ПИКИЧЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 29 апреля 2005 г.)

Методом сложения слоев получено точное решение задачи наклонного прохождения электромагнитной волны через слой со спиральной структурой при постоянном и переменном в пространстве шаге спирали. Рассмотрены поляризационные и энергетические характеристики.

1. Введение

Взаимодействие электромагнитной волны со средами со спиральной структурой, на которое было уделено большое внимание в связи с интересом к оптике холестерических жидких кристаллов [1(3], не перестает быть актуальной задачей. Это связано, в частности, с отсутствием точного решения при наклонном падении. Последний случай рассматривался в [1] и, при наличии магнитооптической активности, в [4]. Задача в [4], как и в [1], решена хотя и приближенно, но аналитически. Представляет интерес точное решение, могущее заполнить отмеченный выше пробел в теории оптических свойств спиральных сред. Оно получено в [5] численным методом на основании метода сложения слоев Амбарцумяна [6], первоначально сформулированного для интенсивностей, а в дальнейшем - для полей [7]. В настоящей работе, в отличие от [5], где изучены только энергетические характеристики при наклонном прохождении (этот вопрос рассмотрен здесь более обстоятельно, чем в [5]), рассматриваются также поляризационные характеристики и неоднородный твист-слой, для которого неприменим дифракционный подход даже приближенно.

2. Метод сложения слоев

Спиральную структуру представим как сложенные друг на друга тонкие анизотропные пластинки из одноосного кристалла, ось которого лежит в плоскости пластинок. При этом каждая из пластинок повернута относительно предыдущей вокруг своей нормали (ось z) на угол $d\psi$; при $d\psi/dz = \text{const}$ имеем спиральную структуру с

постоянным шагом спирали. Направление оси z будем называть направлением "слева направо". Пусть внешняя волна падает на стопку слева, причем плоскость падения совпадает с плоскостью xz. Обозначим тангенциальную компоненту волнового вектора падающей волны через k_x , которая одинакова для всех волн во всех пластинках, из-за независимости диэлектрической проницаемости от координаты x ($\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}(z)$). Введем амплитудные матрицы отражения и прохождения \hat{R}_a , \hat{T}_a *а*-ой пластинки при падении на нее волны слева. Введем также аналогичные матрицы \hat{R}_a , \hat{T}_a при падении волны справа, при том же значении k_x тангенциальной компоненты волнового вектора. С помощью матриц для двух пластинок построим матрицы \hat{R}_{a+b} , \hat{T}_{a+b} для пары пластинок a и b. Матрицы \hat{R}_{a+b} и \hat{T}_{a+b} выражаются через матрицы для отдельных пластинок следующим образом [6]:

$$\widehat{R}_{a+b} = \widehat{R}_a + \widetilde{\widehat{T}}_a \widehat{R}_b (\widehat{I} - \widetilde{\widehat{R}}_a \widehat{R}_b)^{-1} \widehat{T}_a, \qquad \widehat{T}_{a+b} = \widehat{T}_b (\widehat{I} - \widetilde{\widehat{R}}_a \widehat{R}_b)^{-1} \widehat{T}_a, \tag{1}$$

где \widehat{I} – единичная двумерная матрица.

Матрицы \hat{R}_{a+b} и \hat{T}_{a+b} выражаются следующими формулами:

$$\widetilde{\hat{R}}_{a+b} = \widetilde{\hat{R}}_b + \widehat{T}_b \widetilde{\hat{R}}_a (\widehat{I} - \widehat{R}_b \widetilde{\hat{R}}_a)^{-1} \widetilde{\hat{T}}_b, \quad \widetilde{\hat{T}}_{a+b} = \widetilde{\hat{T}}_a (\widehat{I} - \widehat{R}_b \widetilde{\hat{R}}_a)^{-1} \widetilde{\hat{T}}_b.$$
(1a)

Расчет прохождения через спиральную структуру выполнен нами на основании формул (1), (1а) путем их последовательного применения по мере добавления новых пластинок в стопку, которая рассматривается как пластинка "a", а вновь добавляемая – как пластинка "b".

3. Наклонное прохождение через слой со спиральной структурой

а) Энергетические характеристики

На рис.1 представлены частотные зависимости энергетического коэффициента отражения R при разных углах падения. Падающая волна (плоскость падения – плоскость *хz*) имеет эллиптическую поляризацию с компонентами амплитуды электрического поля $E_x = 1$, $E_y = i$. Шаг спирали $\sigma = 0,42$ мкм, компонента тензора диэлектрической проницаемости в направлении директора $\varepsilon_{\parallel} = 2,29$, в направлениях, перпендикулярных к директору, ($\varepsilon_{\perp} = 2,143$, толщина спирального слоя $d = 100 \sigma$.

При отклонении от нормального падения брэгговский столик искажается, а общий уровень осцилляций растет. С увеличением угла падения наблюдается смещение области дифракционного отражения в сторону больших частот. Объяснение этому явлению дано в [5].



Рис.1. Частотная зависимость энергетического коэффициента отражения от среды с параметрами: $\varepsilon_{\parallel} = 2,29$, $\varepsilon_{\perp} = 2,143$, толщина слоя $d=100 \sigma$, шаг спирали, $\sigma = 0,42$ мкм, угол падения $\theta = 0^{\circ}$ (a), $\theta = 30^{\circ}$ (b), $\theta = 45^{\circ}$ (c), $\theta = 75^{\circ}$ (d).

б) Поляризационные характеристики

На рис.2 приведены зависимости эллиптичности поляризации отраженной (**3**г) и прошедшей (**э**t) волн от эллиптичности поляризации падающей волны при нормальном падении. В падающей волне $E_y = 1$, $E_x = i \cdot e$; по оси абсцисс отложена величина *e*. На рис.3 приведены те же зависимости при угле падения $\theta = 75^{\circ}$. В падающей волне $E_s = 1$, $E_p = i \cdot e / \cos \theta$; по оси абсцисс отложена величина *e*.



Рис.2. Зависимость эллиптичности поляризации отраженной (а) и прошедшей (b) волны от эллиптичности поляризации падающей волны при нормальном падении. Параметры среды: $\varepsilon_{\parallel} = 2,29$, $\varepsilon_{\perp} = 2,143$, толщина слоя d = 0,42 мкм, шаг спирали $\sigma = 0,42$ мкм, частота волны $\omega = 3 \cdot 10^{15}$ Гц.



Рис.3. То же, что и на рис.2, но при угле падения $\theta = 75^{\circ}$.

Ход кривых существенно меняется при переходе от случая нормального падения к наклонному. Замечается уменьшение минимальных значений **э**г и **э**t при переходе к наклонному падению.

4. Прохождение через неоднородный твист-слой

Для случая толстых слоев дифракционная теория может быть применена к случаю наклонного падения, но, как было отмечено выше, она применима только приближенно. В случае, когда В слое не содержится так много шагов спирали, чтобы дифракционное отражение сформировалось (условие формирования $\Delta \varepsilon (d / \sigma) >> 1$, где $\Delta \varepsilon$ - анизотропия тензора ε_{ii} , d - толщина слоя, σ - шаг спирали), дифракционная теория не может быть применена вообще. Метод сложения слоев применим также к этому случаю. На рис.4 и 5 приведены кривые частотной зависимости коэффициента отражения спирального слоя со следующими параметрами: дифференциальный шаг спирали на левой границе слоя имеет значение 7,7 мкм и линейно меняется, принимая на правой границе значение, равное 0,42 мкм, d = 0,42 мкм, $\varepsilon_{\parallel} = 2,1,=2,1, \epsilon_{\perp} = 1,5,1,5$. Компоненты поля падающей волны заданы следующим образом: $E_y = 0$, $E_x = 1$. Углы падения на рис.4 и 5 соответственно равны 0° и 30°. Как и в случае толстых слоев, у твист-слоя также наблюдается смещение области дифракционного отражения в сторону больших частот при увеличении угла падения. Наблюдается также снижение максимумов при переходе от нормального падения к наклонному.



Рис.4. Частотная зависимость энергетического коэффициента отражения от твистслоя при нормальном падении. Параметры твист-слоя: ε_{\parallel} =2,1, ε_{\perp} =1,5, дифференциальный шаг спирали меняется от 7,7 мкм до 0,42 мкм, толщина слоя d = 0,42 мкм.

Приведенные выше результаты могут служить основой для постановки новых экспериментов с более детальным сопоставлением с результатами расчетов на основе метода сложения слоев.

ЛИТЕРАТУРА

1. В.А. Беляков, А.С. Сонин. Оптика холестерических жидких кристаллов. М., Наука, 1982.

- 2. П.Де Жен. Физика жидких кристаллов. М., Мир, 1977.
- 3. С.Чандрасекар. Жидкие кристаллы. М., Мир, 1980.
- 4. В.А.Киеня, И.В.Семченко. Кристаллография. 39, 514 (1994).
- 5. О.С.Ерицян, А.А.Папоян, О.М.Аракелян. Изв. НАН Армении, 41, 281 (2006).
- 6. В.А.Амбарцумян. Изв. АН Арм. ССР, Естественные науки, 1-2, 31 (1944).

7. **О.В.Пикичян.** Сообщения Бюраканской обсерватории, **B LV**, 5 (1984).

ԷԼԵԿՏՐԱՄԱԳՆԻՍԱԿԱՆ ԱԼԻՔԻ ԹԵՔ ԱՆՑՈՒՄԸ ՀԱՄԱՍԵՌ ԵՎ ԱՆՀԱՄԱՍԵՌ ՊԱՐՈՒՐԱՅԻՆ ԿԱՌՈՒՑՎԱԾՔՈՎ ՄԻՋԱՎԱՅՐԻ ՇԵՐՏՈՎ

Շերտերի գումարման մեթոդով Ճշգրիտ լուծված է էլեկտրամագնիսական ալիքի թեք անցման խնդիրը պարուրային կառուցվածքով շերտի միջով՝ պարույրի հաստատուն և փոփոխական քայլի դեպքում։

OBLIQUE TRANSMISSION OF ELECTROMAGNETIC WAVE THROUGH HOMOGENEOUS AND INHOMOGENEOUS HELICAL LAYERS

H.S. ERITSYAN, A.A. PAPOYAN, H.M. ARAKELYAN, K.V. PAPOYAN, H.V. PIKICHYAN

The problem of electromagnetic wave transmission through a helical homogeneous and inhomogeneous layers for oblique incidence is solved.

УДК 532.535

УСИЛЕНИЕ ПОВОРОТА ПЛОСКОСТИ ПОЛЯРИЗАЦИИ УСИЛИВАЮЩЕЙ АНИЗОТРОПНОЙ ПЛАСТИНКОЙ

А.А. ГЕВОРГЯН¹, А.М. СЕДРАКЯН²

¹Ереванский государственный университет

²Ереванский государственный университет архитектуры и строительства

(Поступила в редакцию 29 марта 2006 г.)

Предложен простой и эффективный метод измерения малых вращений плоскости поляризации электромагнитной волны. Обсуждены особенности усиления поворота плоскости поляризации при прохождении света через анизотропный слой из поглощающей и усиливающей среды при условии сохранения линейной поляризации. Рассмотрена реальная схема эллипсометра с усилителем, для которой приведены численные оценки.

1. Введение

Оптическая активность (вращение плоскости поляризации) и циркулярный дихроизм с давних времен используются для исследования гиротропных сред. В частности, этим путем возможно получение информации о внутренней молекулярной структуре среды. В настоящее время этот метод считается одним из основных для исследования химических и биологических объектов. В последние годы в области поляриметрических и спектрополяриметрических измерений был достигнут значительный прогресс, позволяющий повысить точность измерений сверхмалых поворотов плоскости поляризации [1-8] (см. также литературу, цитированную в них). Актуальность развития техники высокочувствительной поляриметрии обусловлена в основном следующими обстоятельствами. Теоретически предсказаны эффекты, экспериментальное подтверждение которых требует измерения очень слабых поворотов плоскости поляризации [2,9-13]. Другим примером может служить волноводное распространение СВЧ излучения в нижних слоях атмосферы, которая является гиротропной ввиду присутствия магнитного поля Земли. Очевидно, что из-за малости этого поля измерение изменений азимута поляризации требует предварительного усиления. С другой стороны, умение измерить очень слабые повороты плоскости высокая поляриметрическая поляризации и чувствительность позволили экспериментально обнаружить новые эффекты [2]. Такие измерения позволили бы также уточнить материальные уравнения для уравнений Максвелла [14-17].

Существуют много методов повышения чувствительности поляриметрических
измерений [1-13,18,19]. В работах [20-24] исследовано прохождение света через конечный слой хиральной среды и показано, что если хиральный эффект (разность отражений или прохождений циркулярно-поляризованных волн) при отражении света от полупространства имеет порядок параметра гиротропии, то в случае слоя конечной толщины многократные отражения приводят к многократному увеличению (в $10^2 \div 10^4$ раз) указанных разностей. В работе [2] описан метод использования дихроичной пластинки в качестве усилителя слабых поворотов плоскости поляризации, при этом усиление достигается за счет уменьшения интенсивности сигнала. В работе [3] предложен способ усиления при отражении света от полупространства изотропной среды. Действительно, легко показать, что азимуты электрического вектора в падающем пучке (φ) и отражениом пучке (Ψ) связаны соотношением

$$tg\psi = \frac{r^s}{r^p}tg\varphi = ktg\varphi$$
(1)

или для малых значений φ и не слишком больших значений k

$$\psi = k\varphi \,, \tag{2}$$

но так как $k \ge 1$, то имеет место усиление угла поворота плоскости поляризации. Однако в этом случае также изменение интенсивности, обусловленное изменением азимута поляризации, уменьшается при увеличении коэффициента усиления. Как показано в [3], выбирая соответствующую (большую) мощность излучения, можно измерять предельно малые повороты плоскости поляризации. Так, при работе с шумящими источниками света и большими мощностями излучения этот способ позволяет значительно подавить избыточные шумы светового потока.

Отметим однако, что при определенных задачах значения величин интенсивности сигнала ограничены пределами линейной оптики, что ограничивает область применения указанных методов. Кроме того, большие интенсивности ухудшают чувствительность поляриметрических измерений. В определенных задачах вообще отсутствует возможность получить сигнал большой интенсивности. Все это делает актуальным поиск новых механизмов усиления слабых поворотов плоскости поляризации.

В работах [25-29] рассмотрено усиление изменения азимута поляризации при прохождении света через анизотропную или гиротропную пластинку. В этих случаях интенсивность прошедшего через усилитель света практически мало уменьшается, но появляется эллиптичность (причем, большая) поляризации, которая увеличивает шумы в измерениях, а также ухудшается разрешающая способность устройства, измеряющего азимут. В работах [30-32] предложен высокочувствительный универсальный поляриметр (ВЧУП), который в последнее время нашел широкое применение и который позволяет одновременно измерять параметр оптической активности и двупреломление. В ВЧУП улучшение разрешающей способности достигается за счет максимального упрощения поляриметра, максимально уменьшая число элементов в поляриметре. В работе [33] предложен модифицированный ВЧУП, позволяющий одновременно измерять также круговой дихроизм.

В работе [34] предложен простой и эффективный метод, а именно, использование усиливающей изотропной среды в качестве усилителя поворота плоскости поляризации. В данной работе предлагается использование усиливающей анизотропной среды в качестве усилителя поворота плоскости поляризации при условии сохранения линейной поляризации.

2. Прохождение света через слой анизотропной усиливающей среды

Рассмотрим нормальное падение света на пластинку анизотропного одноосного кристалла с комплексными коэффициентами преломления $n_{x,y} = n'_{x,y} + in''_{x,y}$. Пусть среда занимает область $0 \le z \le d$, плоскость раздела совпадает с плоскостью *xy*, оптическая ось параллельна оси *x* и пластинка с обеих сторон граничит с вакуумом. Рассмотрим случай $\mu = 1$. Электрическое поле падающей волны составляет угол φ по отношению к плоскости поляризации, т.е. его *x*- и *y*компоненты имеют вид

$$E_{0x} = E_0 \sin \varphi \,, \tag{3a}$$

$$E_{0y} = E_0 \cos \varphi \,. \tag{36}$$

Точное аналитическое решение этой граничной задачи хорошо известно [1]. Поляризационные характеристики отраженного и прошедшего полей определяются поляризационными функциями

$$\chi^{r,t} = \frac{E_{r,t}^y}{E_{r,t}^x} = k^{r,t} \operatorname{tg} \varphi , \qquad (4)$$

где $k^{r} = r^{y} / r^{x}$, $k^{t} = t^{y} / t^{x}$. В этом случае для $k^{r,t}$ имеем:

$$k^{r} = \frac{r^{y}(1 - \exp(2i\beta_{y}))(1 - r^{y^{2}}\exp(2i\beta_{y}))}{r^{x}(1 - \exp(2i\beta_{x}))(1 - r^{x^{2}}\exp(2i\beta_{x}))},$$
(5)

$$k^{t} = \frac{(1 - r^{y^{2}})(1 - r^{y^{2}} \exp(2i\beta_{y}))\exp(i\beta_{y})}{(1 - r^{x^{2}})(1 - r^{x^{2}} \exp(2i\beta_{x}))\exp(i\beta_{x})},$$
(6)

где $r^{x,y} = (1 - n_{x,y})/(1 + n_{x,y}), \beta_{x,y} = 2\pi n_{x,y} d / \lambda.$

Тогда азимуты $\psi^{r,t}$ (углы, задающие ориентации больших осей эллипсов поляризации и отсчитываемые от плоскости поляризации) и эллиптичности $e^{r,t}$ (задающие отношение полуосей эллипсов поляризации) определяются соотношениями

$$\psi^{r,t} = 0.5 \operatorname{arctg}\left(\frac{2\operatorname{Re}(\chi^{r,t})}{1-|\chi^{r,t}|^2}\right) = 0.5 \operatorname{arctg}\left(\frac{2\operatorname{Re}(k^{r,t})\operatorname{tg}\varphi}{1-|k^{r,t}|^2\operatorname{tg}^2\varphi}\right),\tag{7}$$

$$e^{r,t} = tg\left(0.5 \arcsin\left(\frac{2 \operatorname{Im}(\chi^{r,t})}{1+|\chi^{r,t}|^2}\right)\right) = tg\left(0.5 \arcsin\left(\frac{2 \operatorname{Im}(k^{r,t} tg\varphi)}{1+|k^{r,t}|^2 tg^2\varphi}\right)\right).$$
 (8)

Коэффициенты усиления $f^{r,t}$ по азимуту – это производные $\psi^{r,t}$ по φ . Из (8) для $f^{r,t}$ получаем

$$f^{r,t} = \frac{d\psi^{r,t}}{d\varphi} = -\frac{\operatorname{Re}(k^{r,t})\left(1 + |k^{r,t}|^2 \operatorname{tg}^2 \varphi\right)}{\cos^2 \varphi \left[\left(1 - |k^{r,t}|^2 \operatorname{tg}^2 \varphi\right)^2 + 4\left(\operatorname{Re}(k^{r,t})\right)^2 \operatorname{tg}^2 \varphi \right]} .$$
(9)

Другой важной характеристикой усилителя азимута поляризации является его разрешающая способность *R*. Согласно [25], для разрешающей способности имеем

$$R = \left| \frac{d\psi}{d\varphi} \frac{\delta\varphi}{\delta\psi} \right| = \sqrt{\frac{1 - e^2}{1 + e^2}} \frac{1 + e_0^2}{1 - e_0^2} \left(\frac{d\psi}{d\varphi} \right)^2 \frac{I}{I_0} \quad . \tag{10}$$

Легко показать, что если выполняются условия

$$\frac{2\pi d \operatorname{Re}(n_x)}{\lambda} = \pm (2m_1 + 1)\frac{\pi}{2} , \qquad \frac{2\pi d \operatorname{Re}(n_y)}{\lambda} = \pm (2m_2 + 1)\frac{\pi}{2} , \qquad (11)$$

где *m* и *m*₂ – целые числа, то имеет место усиление поворота плоскости поляризации с сохранением линейной поляризации сигнала (см. также [27]). Однако, как и в случае дихроичной пластинки, в этом случае также улучшения разрешающей способности не происходит [27]. Этого можно добиться, если среду обогатить активными (резонансными) атомами, что будет показано ниже.

Сначала предположим, что слой анизотропной среды является поглощающей. В этом случае $n''_{x,y}$ будут положительными величинами. На рис.1а, в представлены зависимости усиления поворота плоскости поляризации f^t и разрешающей способности R^t от азимута φ и от длины волны λ . Как видно из рисунка и как показывают численные результаты, коэффициент усиления вблизи азимута $\varphi = \pi/2$ (а на длине волны, удовлетворяющей условиям (11), эллиптичность поляризации именно на азимуте $\varphi = \pi/2$ равняется нулю) получается большим. Однако, как и следовало ожидать, таким образом не удается улучшить разрешающую способность устройства, измеряющего азимут (рис.1b). Действительно, на рис.2a,b,c представлены зависимости f^t , e^t и R^t от азимута φ , показывающие, что хотя на азимуте максимального усиления эллиптичность равняется нулю, на этом азимуте разрешающая способность устройства намного меньше единицы.

Теперь будем предполагать, что слой анизотропной среды является усиливающим. В этом случае $n''_{x,y}$ являются отрицательными величинами. На рис.1с, d представлены зависимости усиления поворота плоскости поляризации f^t и разрешающей способности R^t от азимута φ и от длины волны λ . Как видно из рисунка и как показывают численные результаты, в этом случае также коэффициент усиления f^t вблизи азимута $\varphi = \pi/2$ получается большим. Однако, в этом случае также удается получить улучшение разрешающей способности устройства,

измеряющего азимут. Действительно, на рис. 2а,b,с представлены зависимости f^t , e^t и R^t от азимута φ , показывающие, что на азимуте максимального усиления отсутствует эллиптичность поляризации, а разрешающая способность значительно больше единицы ($R^t > 5$ при данных параметрах).



Рис.1. Зависимость усиления поворота плоскости поляризации f^t (a,c) и разрешающей способности R^t от азимута φ и от длины волны λ в случае, когда слой анизотропной среды является поглощающим (a,b) и усиливающим (c,d). Параметры таковы: $n'_x = 1,5$; $n'_y = 3$, $\lambda = 0.6 \ \mu\text{m}$; $d = 200 \ (\text{m}; n_0 = 1; n''_{x,y} = 0.001 \ (a,b); n''_{x,y} = -0.001 \ (c,d).$

В заключение этого параграфа отметим, что этот метод может обеспечить улучшение разрешающей способности при произвольной поляризационной геометрии поляриметра, причем не налагается никаких ограничений на величину интенсивности сигнала.

Отметим также, что эти устройства можно использовать также для стабилизации азимута поляризации. Действительно, так как при изменении азимута φ в интервале от 0 до π азимут Ψ также изменяется от 0 до π , то это означает, что если имеется интервал, где $d\Psi/d\varphi >> 1$, то непременно должен существовать также интервал изменения φ , где $d\Psi/d\varphi << 1$.



Рис.2. Зависимости f^t (a,d), e^t (b,e) и R^t (c,f) от азимута φ . Остальные параметры те же, что и на рис.1.

3. Поляриметр с усилителем

Теперь рассмотрим реальный поляриметр с усилителем поворота плоскости поляризации (рис.3). При этом для сравнения будем рассматривать тот же поляриметр без усилителя. Прохождение света через поляриметр будем рассматривать при помощи формализма Джонса. Согласно этому формализму, вектор-столбец выходящего пучка выражается через вектор-столбец входящего пучка и матрицы Джонса элементов поляриметра посредством уравнений

$$E_{out} = \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{-x} & 0 \\ 0 & e^{-y} \end{bmatrix}^{\text{Polarizer}(0^0)} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$
(12)

в первом случае и

$$E_{out} = \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$
(13)

во втором случае. Здесь $x = -i2\pi d(n_x + in_x)/\lambda$, $y = -i2\pi d(n_y + in_y)/\lambda$, α – угол вращения плоскости поляризации исследуемого вещества. Для интенсивности выходящего сигнала для первого и второго случаев соответственно получаем

$$I \propto E_{out}^2 = \sin^2 \alpha \exp\left(-\frac{4\pi dn_x^{"}}{\lambda}\right), \qquad (14)$$

$$I \propto E_{out}^2 = \sin^2 \alpha \,. \tag{15}$$



Рис.3. Схема эллипсометра с усилителем поворота плоскости поляризации. *L* - источник света, *P* – поляризатор, *E* – образец, *A* – усиливающая среда, *An* – анализатор, *D* – детектор.

Наши вычисления, в частности, показывают, что при параметрах $\alpha = 10^{-7}$ рад, $d = 500 \ \mu\text{m}$, $= 0.6 \ \mu\text{m}$ m, $n''_x = -0.001$ для относительного изменения интенсивности ($\Delta I/I$) получаем $\Delta I/I = 10^{-14}$ при отсутствии усилителя вращения плоскости поляризации и $\Delta I/I = 3.53 \cdot 10^{-10}$ при наличии усилителя. Такое изменение интенсивности без усилителя происходило бы при $\alpha \cong 1.88 \cdot 10^{-5}$ рад. Таким образом, при данных параметрах имеем увеличение изменения интенсивности на четыре порядка, что может стать важным при измерении слабых поворотов плоскости поляризации. Естественно, при соответствующем подборе параметров усилителя можно получить и более хорошие результаты.

4. Заключение

Предложен простой и эффективный метод измерения малых вращений плоскости поляризации электромагнитной волны. Исследованы особенности усиления поворота плоскости поляризации при прохождении света через анизотропный слой поглощающей и усиливающей среды при условии сохранения линейной поляризации. Рассмотрена реальная схема эллипсометра с усилителем и приведены соответствующие численные расчеты угла поворота плоскости поляризации.

В заключение отметим, что описанный в данной работе чувствительный метод регистрации изменений состояния поляризации света может быть применен также для регистрации слабых изменений параметров сред под влиянием различных воздействий.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. Р.Аззам, Н.Башара. Эллипсометрия и поляризованный свет. М., Мир, 1981.
- 2. В.С.Запасский. ЖПС, 37, 181 (1982).
- 3. К.К.Свиташев, Г.Хасанов. Опт. и спектр., 54, 538 (1982).
- 4. E.Collett. Polarized Light. N.Y., Dekker, 1993.
- H.G.Tompkins, W.A.McGahan. Spectroscopic Ellipsometry and Reflectometry: A User's Guide. N.Y., Wiley, 1999.

- 6. S.L.Blakeney, S.E.Day, J.N.Stewart. Opt. Comm., 214, 1 (2002).
- 7. Xu Kun, Yitang Dai. Opt. Commun., 215, 309 (2003).
- 8. Yu-Lung Lo, Yu.Tsung-Chih. Opt. Commum., 259, 40 (2006).
- 9. В.А.Алексеев, Б.Я.Зельдович, И.И.Собельман. УФН. 118, 385 (1976).
- 10. И.Б.Хриплович. Несохранение четности в атомных явлениях. М., Наука, 1981.
- 11. С.С.Петров. ЖТФ, **71**, ¹3, 81 (2001).
- 12. Г.Б.Малыкин, Ю.И.Неймарк. ЖТФ, **68**, ¹11, 128 (1998).
- 13. C.Wieman, T.W.Hansch. Phys. Rev. Lett., 36, 1170 (1976).
- 14. W.S.Weiglhofer, A.Lakhtakia. J. Opt. Soc. Am., A, 13, 385 (1996).
- 15. A.R.Bungay, Yu.P.Svirko, N.I.Zheludev. Phys. Rev., B, 47, 11730 (1993).
- 16. A.P.Vinogradov, A.V.Aivazyan. Phys. Rev. E, 60, 987 (1999).
- 17. A.P.Vinogradov. Usp. Fiz. Nauk, 172, 363 (2002).
- 18. A.Lakhtakia. J. Opt. Soc. Am., A, 19, 807 (2002).
- 19. G.Litfin, C.R.Pollock, R.F.Curl, F.K.Tittel. J. Chem. Phys., 72, 6602 (1980).
- 20. S.Bassiri, C.H.Papas, N.Engheta. JOSA A, 4, 1450 (1988).
- 21. M.Schmidt, K.Eidner. Optik., 80, 43 (1990).
- 22. I.J.Lalov, A.I.Miteva. Mod. Opt., 38, 395 (1990).
- 23. M.P.Silverman, J.Badoz. JOSA A, 11, 1894 (1994).
- 24. А.Ф.Константинова, Б.В.Набатов. Кристаллография, 40, 219 (1995).
- 25. М.А.Ганапетян, А.А.Геворгян и др. Изв. АН Арм.ССР, Физика, 22, 101 (1987).
- 26. **А.А.Геворгян**. ФНТ, **13**, 668 (1987).
- 27. Г.А.Варданян, А.А.Геворгян. Изв. НАН Армении, Физика, 31, 267 (1996).
- 28. В.Х.Гарибян, А.А.Геворгян и др. Изв. НАН Армении, Физика, 32, 20 (1997).
- 29. А.А.Геворгян. Опт. и спектр., 91, 830 (2001).
- 30. J.Kobayashi, Y.Uesu. J. Appl. Crystallogr., 16, 204 (1983).
- 31. J.Kobayashi, H.Kumomi, K.Saito. J. Appl. Crystallogr., 19, 377 (1986).
- 32. J.Kobayashi, T.Asahi, S.Takahashi, A.M.Glazer. J. Appl. Crystallogr., 21, 479 (1988).
- 33. J.Kobayashi, T.Asahi, M.Sakurai, M.Takahashi, K.Okubo. Phys. Rev., A53, 11784 (1996).
- 34. A.H.Gevorgyan, A.A. Grigoryan, et al. Optik (2006). (in press).

ԲԵՎԵՌԱՅՄԱՆ ՀԱՐԹՈՒԹՅԱՆ ՊՏՈՒՅՏԻ ՈՒԺԵՂԱՅՈՒՄԸ ԱՆԻՉՈՏՐՈՊ ՈՒԺԵՂԱՅՆՈՂ ԹԻԹԵՂՈՒՄ

Ա.Հ. ԳԵՎՈՐԳՅԱՆ, Ա.Մ. ՍԵԴՐԱԿՅԱՆ

Առաջարկված է էլեկտրամագնիսական ալիքի բևեռացման հարթության փոքր պտույտի չափման պարզ և արդյունավետ մի եղանակ։ Քնարկված են բևեռացման հարթության պտույտի ուժեղացման առանձնահատկությունները, երբ լույսը անցնում է կլանող և ուժեղացնող անիզոտրոպ միջավայրի շերտով, ընդ որում պահպանելով գծային բևեռացումը։ Առաջարկված է ուժեղացուցիչով էլիպսոմետրի սխեմա, բերված են թվային հաշվարկներ։

AMPLIFICATION OF THE POLARIZATION PLANE ROTATION BY AN ANISOTROPIC AMPLIFYING PLATE

A.H. GEVORGYAN, A.M. SEDRAKYAN

A simple and effective method to measure weak rotations of electromagnetic wave polarization planes in various media is proposed. The features of the polarization plane rotation amplification for the light reflection and transmisson through the absorbing and amplifying anisotropic layers are considered. The scheme of ellipsometer with a polarization plane rotation amplifier is proposed. УДК 621.315

ВЛИЯНИЕ ФОРМЫ ОГРАНИЧИВАЮЩЕГО ПОТЕНЦИАЛА НА ТЕМП РЕЛАКСАЦИИ ИМПУЛЬСА НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В КВАНТОВОЙ ПРОВОЛОКЕ

Ш.Г. ГАСПАРЯН, А.А. КИРАКОСЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 14 апреля 2006 г.)

Исследовано влияние формы ограничивающего потенциала квантовой полупроводниковой проволоки круглого сечения на темп релаксации импульса и подвижность носителей заряда (НЗ) при рассеянии на неэкранированном кулоновском примесном центре. Расчеты проведены с учетом различия эффективной массы НЗ в проволоке и окружающей среде и диэлектрической неоднородности системы, находящейся в продольном магнитном поле. Получены зависимости темпа релаксации импульса и подвижности НЗ от волнового числа, концентрации сплава, радиуса проволоки, индукции магнитного поля и температуры системы для конечного параболического и прямоугольного ограничивающих потенциалов. Численные оценки проведены для системы GaAs–Ga1-xAlxAs.

1. Введение

Квазиодномерные квантовые структуры интенсивно исследуются как объекты, имеющие большие возможности прикладных применений и большую значимость для фундаментальных исследований в области физики низкоразмерных систем [1-3].

В квантовых проволоках, помимо свойственной низкоразмерным системам коренной перестройки энергетического спектра H3, имеет место эффект подавления рассеяния, приводящий к специфическому поведению их физических характеристик [4].

Кинетические характеристики квантовых полупроводниковых проволок для различных механизмов рассеяния исследованы во многих работах (см., напр., [4-12] и многочисленные ссылки в них). Следует особо отметить, что при примесном рассеянии в низкоразмерных системах принципиальное значение имеет учет диэлектрической неоднородности системы (неравенства диэлектрических постоянных проволоки и окружающей среды), роль которой возрастает с понижением размерности системы [10,13-15].

В данной работе в рамках модели квантовой проволоки, аппроксимируемой параболической и прямоугольной ямами конечной глубины, рассчитан темп релаксации импульса при рассеянии НЗ на неэкранированных кулоновских примесных центрах, расположенных на оси проволоки, с учетом различия эффективной массы НЗ в проволоке и окружающей среде, а также диэлектрической неоднородности системы. Предполагается, что система находится в однородном магнитном поле, направленном вдоль оси проволоки.

2. Теория

Рассмотрим квантовую проволоку радиуса R и длиной L >> R из полупроводника с диэлектрической постоянной ε_1 , помещенную в среду с ε_2 , в магнитном поле **B**, направленном вдоль оси проволоки. Гамильтониан H3 имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2\rho} \frac{\partial}{\partial\rho} \left(\frac{1}{M} \rho \frac{\partial}{\partial\rho} \right) - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{i\hbar\omega}{2} \frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{M\omega^2 \rho^2}{8} + V(\rho), \quad (1)$$

где эффективная масса M и циклотронная частота ω принимают, соответственно, значения m_1 и $\omega_{1B} = eB/m_1$ в проволоке ($\rho \leq R$), m_2 и $\omega_{2B} = eB/m_2$ в окружающей проволоку среде ($\rho > R$), $V(\rho)$ – ограничивающий потенциал.

Ввиду аксиальной симметрии системы решения уравнения Шредингера с гамильтонианом (1) можно представить в виде

$$\psi_{nmk}(\rho, \varphi, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} \exp[i(kz + m\varphi)] \cdot \begin{cases} f_{nm}^{(1)}, & \rho \le R, \\ f_{nm}^{(2)}, & \rho > R. \end{cases}$$
(2)

В случае прямоугольного ограничивающего потенциала (RP), когда $V(\rho) = 0$ при $\rho \le R$ и $V(\rho) = V_0$ при $\rho > R$, радиальные части волновой функции в (2) можно представить в виде [16]

$$f_{nm}^{(1)}(\rho) = C_{1nm} \exp\left(-\frac{\rho^2}{4l_B^2}\right) \rho^{|m|} F\left(-\lambda_1, |m|+1; \frac{\rho^2}{2l_B^2}\right),$$
(3)

$$f_{nm}^{(2)}(\rho) = C_{2nm} \exp\left(-\frac{\rho^2}{4l_B^2}\right) \rho^{|m|} U\left(-\lambda_2, |m|+1; \frac{\rho^2}{2l_B^2}\right).$$
(4)

В (2)–(4) введены следующие обозначения: k – волновое число электрона вдоль оси z, $n = 1,2,..., m = 0,\pm 1,\pm 2,...$ – квантовые числа, V_0 – высота потенциального барьера, F(a,b;t) и U(a,b;t) – вырожденные гипергеометрические функции [17], $l_B = (\hbar/eB)^{1/2}$ – магнитная длина, C_{1nm} , C_{2nm} – постоянные нормировки,

$$\lambda_{1} \equiv \lambda_{1nm} = \frac{E_{nm}}{\hbar\omega_{1B}} - \frac{|m| + m + 1}{2}, \qquad \lambda_{2} \equiv \lambda_{2nm} = \frac{E_{nm} - V_{0}}{\hbar\omega_{2B}} - \frac{|m| + m + 1}{2}.$$
 (5)

Собственные значения энергии E_{nm} определяются из условия непрерывности логарифмической производной волновой функции на границе "проволока–среда" $\rho = R$:

$$\frac{m_2}{m_1} \left[\frac{1}{2} - \frac{|m|l_B^2}{R^2} + \frac{\lambda_1 F(-\lambda_1 + 1, |m| + 2; \frac{R^2}{2l_B^2})}{(|m| + 1)F(-\lambda_1, |m| + 1; \frac{R^2}{2l_B^2})} \right] = \left[\frac{1}{2} - \frac{|m|l_B^2}{R^2} - \frac{\lambda_2 U(-\lambda_2 + 1, |m| + 2; \frac{R^2}{2l_B^2})}{U(-\lambda_2, |m| + 1; \frac{R^2}{2l_B^2})} \right].$$
(6)

В случае параболического ограничивающего потенциала (PP) $V(\rho) = m_1 \omega_0^2 \rho^2 / 2$ при $\rho \leq R$ и $V(\rho) = V_0$ при $\rho > R$, радиальную часть волновой функции в области ямы можно представить в виде

$$f_{nm}^{(1)}(\rho) = C_{1nm} \exp\left(-\frac{\rho^2}{4\tilde{l}^2}\right) \rho^{|m|} F(-\lambda_1', |m|+1; \frac{\rho^2}{2\tilde{l}^2}) , \qquad (7)$$

где $\omega_0 = \left(2V_0 / m_1\right)^{1/2} / R$, $\tilde{l} = (\hbar / m_1 \tilde{\omega})^{1/2}$ – приведенная магнитная длина, $\tilde{\omega} = (\omega_0^2 + \omega_{1B}^2)^{1/2}$,

$$\lambda_{1}^{\prime} \equiv \lambda_{1nm}^{\prime} = \frac{E_{nm}}{\hbar \widetilde{\omega}} - \frac{1}{2} \left(|m| + 1 + \frac{\omega_{1B}}{\widetilde{\omega}} m \right), \qquad (8)$$

а в области барьера $f_{nm}^{(2)}$ дается выражением (4). Условие непрерывности логарифмической производной волновой функции в рассматриваемом случае получается путем замены в левой части уравнения (6) l_B на \tilde{l} и λ_1 на λ'_1 .

2.1. Расчет темпа релаксации

Перейдем к расчету темпа релаксации импульса H3 в проволоке. Предположим, что H3 рассеивается на неэкранированном кулоновском центре с зарядом e' = e, находящемся на оси проволоки. Для вычисления матричного элемента энергии взаимодействия H3 с заряженным центром V_i в проволоке (i = 1) и в окружающей среде (i = 2) воспользуемся выражением [18]

$$V_i(\rho, z) = -\frac{2ee'}{\pi\varepsilon_1} \int_0^\infty \cos tz F_i(t\rho) dt , \qquad (9)$$

где

$$F_1(t\rho) = K_0(t\rho) + I_0(t\rho) \frac{(\alpha - 1)K_0(Rt)K_1(Rt)}{\alpha K_0(Rt)I_1(Rt) + I_0(Rt)K_1(Rt)}, \quad \rho \le R ,$$
(10)

$$F_2(t\rho) = K_0(t\rho) \frac{\alpha}{tR[\alpha K_0(Rt)I_1(Rt) + I_0(Rt)K_1(Rt)]}, \quad \rho > R,$$
(11)

 $\alpha = \varepsilon_1/\varepsilon_2$ – параметр диэлектрической неоднородности системы, $I_n(x)$ и $K_n(x)$ – модифицированные функции Бесселя порядка *n*, соответственно, первого и второго рода.

В условиях заполнения только первой подзоны размерного квантования для темпа релаксации импульса получим:

$$\frac{1}{\tau(k)} = \frac{n_i}{\tau_0 k} \frac{m^*}{m_1} \left[J_1(k) + \alpha J_2(k) \right]^2,$$
(12)

где $\tau_0 = m_1 a_B^2 / 16\hbar$, $a_B = \varepsilon_1 \hbar^2 / m_1 e^2$ – эффективный боровский радиус, n_i –линейная концентрация примесных центров, $(m^*)^{-1} = pm_1^{-1} + (1-p)m_2^{-1}$ – единая для всей системы эффективная масса, p – вероятность нахождения электрона в проволоке [19],

$$J_1(k) = \int_0^R F_1(2k\rho) f_{10}^{(1)2}(\rho) \rho d\rho , \qquad J_2(k) = \int_R^\infty F_2(2k\rho) f_{10}^{(2)2}(\rho) \rho d\rho .$$
(13)

2.2. Расчет подвижности

Для расчета подвижности H3, движущихся вдоль оси проволоки, воспользуемся формулой [20]

$$\mu = \frac{e\hbar^2}{m^*} \frac{\int k^2 \tau(E_k) (-\partial f_0 / \partial E_k) dk}{\int f_0(E_k) dk},$$
(14)

где $f_0(E_k)$ – функция распределения H3, находящихся на нижнем уровне энергии размерного квантования, E_k – кинетическая энергия H3. Условие заполнения только первой подзоны размерного квантования приводит к ограничению значений волнового числа величиной

$$k_{\max} = \frac{1}{\hbar} \left[2m^* (E_{1m} - E_{10}) \right]^{1/2},$$
(15)

где E_{1m} – дно ближайшей к основной подзоны.

В условиях вырождения из (14) следует выражение подвижности $\mu_F = e\tau(k_F)/m^*$, где фермиевское волновое число $k_F = \pi n_e/2$, n_e – линейная концентрация НЗ. Заметим, что при значениях $n_e = n_i = 10^6$ см⁻¹ газ НЗ можно считать сильно вырожденным уже при $T \le 30$ К.

В условиях применимости больцмановской статистики для подвижности имеем:

$$\mu_T = \frac{e}{m^*} \frac{\int_{0}^{k_{\max}/k_T} \tau(x) x^2 \exp(-x^2/2) dx}{\int_{0}^{k_{\max}/k_T} \exp(-x^2/2) dx},$$
(16)

где $k_T = (m^* K_B T)^{1/2} / \hbar.$

3. Обсуждение результатов

Численные расчеты выполнены для проволоки GaAs, находящейся в матрице Ga1-xAlxAs с использованием следующих значений: $m_1 = 0.067m_0$, $m_2 = (0.067 + 0.083x)m_0$, $\varepsilon_1 = 13.18$, $\varepsilon_2 = \varepsilon_1 - 3.12x$, $V_0 = 1.247Q_ex$ (эВ) (m_0 – масса свободного электрона, Q_e – доля разрыва потенциальной энергии, приходящаяся на зону проводимости), x – концентрация сплава [21]. Введем также характеризующий магнитное поле параметр $\gamma = a_B^2 / l_B^2 \sim B$.

Проведем сначала оценку k_{\max} для значений параметров, используемых в расчетах. На рис.1 представлены графики зависимости уровней энергии E_{nm} от параметра γ для проволоки с $R = a_B$ при x = 0.1 (рис.1а) и x = 0.4 (рис.1b) для n = 1, $m = 0, \pm 1$. При $\gamma = 0$, x = 0.1 в случае RP $k_{\max} = 1.78 \cdot 10^6$ с^{м-1}, а в случае PP $k_{\max} = 2.3 \cdot 10^6$ с^{м-1}. При x = 0.4 соответствующие значения равны $k_{\max} = 2.04 \cdot 10^6$ с^{м-1} (RP) и $k_{\max} = 3 \cdot 10^6$ с^{м-1} (PP).





С ростом γ расстояние между подзонами (1,0) и (1,-1) уменьшается, что приводит к уменьшению значений k_{max} . Так, при $\gamma = 5$ ($B \approx 30$ 7) для случая RP $k_{\text{max}} = 9.86 \cdot 10^5$ см⁻¹ при x = 0.1 и $k_{\text{max}} = 1.15 \cdot 10^6$ см⁻¹ при x = 0.4. В случае PP, соответственно, $k_{\text{max}} = 1.56 \cdot 10^6$ см⁻¹ и $k_{\text{max}} = 2.29 \cdot 10^6$ см⁻¹.



На рис.2 представлена зависимость темпа релаксации импульса электрона от волнового числа в параболической и прямоугольной ямах с $R = a_B$ при различных значениях концентрации сплава x и индукции магнитного поля $\gamma = 0$ (рис.2a) и $\gamma = 5$ (рис.2b). При $\gamma = 0$ и значении $k = 10^6$ см⁻¹ отношение темпов релаксации в параболической и прямоугольной ямах $A \equiv \tau_{PP}^{-1}/\tau_{RP}^{-1} \approx 1.51$ при x = 0.1 и $A \approx 1,74$ при x = 0.4. В случае $R = 0.5a_B$, при том же значении $k = 10^6$ см⁻¹ $A \approx 1,11$ при x = 0.1 и A = 1,55 при x = 0.4, т.е., с увеличением xвозрастает влияние формы ограничивающего яму потенциала на темп релаксации импульса. Из рис.2a и 2b следует также, что с увеличением x влияние магнитного поля на темп релаксации ослабевает. Отметим, что в случае бесконечно глубокой ямы при $R = a_B$ и $k = 10^6$ см⁻¹ отношение темпов релаксации практически не отличается от единицы: $A \approx 1,024$ $(\gamma = 0), A \approx 1,022$ ($\gamma = 5$) [22].

С ростом магнитного поля (при фиксированных x, R и k) $\tau_{PP}^{-1}(k)$ и $\tau_{RP}^{-1}(k)$ возрастают, однако их отношение приближается к единице, что указывает на ослабление влияния формы ограничивающего потенциала. Такое поведение параметра A обусловлено уменьшением размеров области локализации H3 из-за сильного магнитного квантования $(l_B < R)$.

На рис.3 представлены графики зависимости подвижности электрона от индукции магнитного поля в случае вырождения (рис.3а) и в отсутствие вырождения (рис.3b).



С усилением магнитного поля подвижность монотонно уменьшается для всех значений концентрации сплава x. При этом, в случае вырождения значения подвижности, соответствующие большим значениям x, меньше при всех значениях γ , а значения подвижности в случае параболического ограничивающего потенциала меньше значений подвижности для прямоугольного ограничивающего потенциала. В отсутствие вырождения значения подвижности по порядку больше значений, соответствующих случаю вырождения (рис.3b).

С уменьшением радиуса проволоки уменьшаются как значения подвижности (для всех значений x), так и скорость ее убывания в зависимости от γ , при этом последняя существенно зависит от значения x (с ростом $x \mid \mu'(\gamma) \mid$ уменьшается). Влияние формы ограничивающего потенциала четко выражено при больших значениях x и слабо зависит от γ , что обусловлено преобладанием роли размерного квантования над магнитным.

На рис.4 представлены графики зависимости подвижности от концентрации сплава. Для вырожденного газа (рис.4а) при x = 0.1 $\mu_F^{RP} / \mu_F^{PP} = 1.44$, а для невырожденного газа (рис.4b) $\mu_T^{RP} / \mu_T^{PP} = 1.25$. С ростом магнитного поля эти отношения уменьшаются.





При возрастании концентрации сплава от значения x = 0.1 до x = 0.4 для проволоки с $R = a_B$ и $\gamma = 0$ подвижность в случае вырождения уменьшается: в случае RP – на 27.4%, а в случае PP – на 56,4%. В сильном магнитном поле $\gamma = 5$ эти изменения составляют, соответственно, 14,7% и 47,7%. В отсутствие вырождения (рис.4b), при $\gamma = 0$ уменьшение μ_T^{RP} составляет 33.8%, а $\mu_T^{PP} - 61.2$ %. При усилении магнитного поля относительные изменения подвижности уменьшаются существенно, составляя для случая PP 48,8%. Усиливается также скорость убывания подвижности.

Расчеты показывают, что с уменьшением радиуса проволоки, из-за усиления роли размерного квантования скорость убывания подвижности с ростом *x* увеличивается. Так, при $R = 0.5a_B$ (при $\gamma = 0$) в случае вырождения подвижность в случае RP уменьшается на 48.4%, а в случае PP – на 63.1%. В отсутствие вырождения, при $\gamma = 0$ μ_T^{RP} уменьшается на 58.8%, а μ_T^{PP} – на 71%.

На рис.5 представлены графики зависимости подвижности от радиуса проволоки. В случае вырождения (рис.5а) с увеличением радиуса проволоки подвижность быстро увеличивается при $\gamma = 0$, а при $\gamma \neq 0$ выходит на плато при значениях R^* , зависящих от величины γ (чем больше γ , тем меньше R^*). Заметим также, что при всех значениях $R \ \mu^{RP}(R) > \mu^{PP}(R)$, и эта разность уменьшается с усилением магнитного поля.

В случае отсутствия вырождения условие заполнения первой подзоны ограничивает область изменений радиуса проволоки, и в этой области R для всех значений $\gamma \le 5$ подвижность монотонно возрастает (рис.5b).

Согласно расчетам температурной зависимости подвижности, в невырожденном газе с повышением температуры подвижность монотонно увеличивается, при этом, с усилением магнитного поля ее значение уменьшается (на рис.3b, 4b и 5b представлены кривые подвижности при 300К в условиях заполнения только первой подзоны). Отношение подвижностей при фиксированной температуре уменьшается с ростом магнитного поля, а влияние формы ограничивающего потенциала на значение подвижности усиливается с ростом температуры. Так, при $\gamma = 0$, T = 150 К $\mu_T^{PP} / \mu_T^{RP} = 0.75$, а при T = 250 К это отношение равно 0.78. Заметим, также, что при x = 0.4 значения подвижности в случае RP больше значений ри x = 0.1 во всем интервале температуре.



Рис.5.

Сравнение полученных данных с результатами [24] показывает, что при высоких температурах ($T \approx 300$ K) отношение подвижностей при рассеянии на ограниченных LO-фононах и на примесных центрах порядка 10^{-4} , что указывает на обоснованность пренебрежения примесным рассеянием в указанной области температур.

Согласно полученным данным, форма ограничивающего проволоку потенциала существенно влияет на темп релаксации импульса и подвижность H3, а мера этого влияния количественно определяется значениями параметров задачи. Так, например, влияние концентрации сплава на темп релаксации импульса четко проявляется при сравнительно малых ($k \le 5 \cdot 10^5$ см⁻¹) значениях волнового числа. Усиление магнитного поля приводит к ослаблению влияния формы ограничивающего потенциала, а повышение температуры и увеличение радиуса проволоки, – наоборот, к усилению этого влияния. Из результатов расчетов также следует, что параболический потенциал ограничения больше подвержен влиянию различных факторов воздействия (магнитное поле, температура, концентрация сплава), чем прямоугольный потенциал ограничения, что можно учесть при количественных расчетах различных моделей с требуемыми физическими характеристиками.

Работа выполнена в рамках государственной целевой программы Республики Армения "Полупроводниковая наноэлектроника" и при поддержке гранта ANSEF 05-PS-nano-0811-228.

ЛИТЕРАТУРА

- A.R.Goci, A.Pinczuk, J.S.Weiner, J.M.Calleja, B.S.Dennis, L.N.Pfeiffer, K.W.West. Phys. Rev. Lett., 67, 3298 (1991).
- J.M.Calleja, B.S.Dennis, A.Pinczuk, S.Schmittrink, L.N.Pfeiffer, K.W.West, J.F.Muller, R.Hull. Surf. Sci., 263, 346 (1992).
- W.Wegscheider, L.N.Pfeiffer, M.M.Dignam, A.Pinczuk, K.W.West, S.L.Mccall, R.Hull. Phys. Rev. Lett., 71, 4071 (1999).
- 4. H.Sakaki. Japan. Journ. Appl. Phys., 19, L735 (1980).
- 5. Lian Zheng, S. Das Sarma. Solid State Commun., 104, 628 (1997).
- 6. B.Tanatar, N.C.Constantinou. J. Phys. Condens. Matter, 6, 5113 (1994).
- 7. P.Vagner, M.Mosko. J. Appl. Phys., 81, 3197 (1997).
- 8. V.I.Pipa, N.Z.Vagner, V.V.Mitin, M.Stroscio. Phys. Rev.B, 64, 235322 (2001).
- 9. N.A.Poklonski, E.F.Kislyakov, S.A.Vyrko. Semiconductors, 37, 710 (2003).

- 10. А.А.Киракосян, Ш.Г.Гаспарян. Изв. НАН Армении, Физика, 37, 364 (2002).
- T.Sugaya, J.P.Bird, D.K.Ferry, A.Sergeev, V.Mitin, K.Y.Jang, M.Ogura, Y.Sugiyama. Appl. Phys. Lett., 81, 727 (2002).
- 12. F.B.Beleznay, F.Bogar, J.Ladik. J. Chem. Phys., 119, 5690 (2003).
- 13. G.Goldoni, F.Rossi, A.Orlandi, M.Rontani, F.Manghi, E.Molinari. Physica E, 6, 482 (2000).
- 14. M.M.Aghasyan, A.A.Kirakosyan. Physica E, 8, 281 (2000).
- 15. A.Kh.Manaselyan, A.A.Kirakosyan. Physica E, 22, 825 (2004).
- 16. Hui Lin Zhao, Yun Zhu, Shechao Feng. Phys. Rev. B, 40, 8107 (1989).
- 17. Справочник по специальным функциям, под ред. М.Абрамовица и И.Стиган. М., Наука, 1979.
- 18. Д.Д.Иваненко, А.А.Соколов. Классическая теория поля. М., ГИТТЛ, 1951.
- 19. **G.Bastard**. Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures. Les editions de Physique. Les Ulis, Cedex, France, 1988.
- 20. J.Lee, H.Spektor. Journ. Appl. Phys., 54, 3921 (1985).
- 21. S.Adachi. J. Appl. Phys., 58, R1 (1985).
- 22. Sh.G.Gasparyan, A.A.Kirakosyan. Proc. of 5th Int. Conf. on Semiconductor Micro- and Nanoelectronics, Armenia, Agveran, p.145 (2005).
- 23. S.G.Yu, K.W.Kim, M.A.Stroscio, G.J.Iafrate, A.Bellatto. Phys. Rev. B, 50, 1733 (1994).
- 24. A.L.Vartanian. Phys. Stat. Sol.(b), 242, 1482 (2005).

INFLUENCE OF CONFINING POTENTIAL SHAPE ON THE MOMEMTUM RELAXATION RATE OF CHARGE CARRIERS IN A QUANTUM WIRE

SH.G. GASPARYAN, A.A. KIRAKOSYAN

The effect of the confining potential shape of a semiconductor quantum wire of circular section on the momentum relaxation rate and mobility of charge carriers (CC) in scattering by an unshielded Coulomb impurity center is investigated. The calculations are carried out, taking into account the effective mass difference in the wire and in surrounding medium, the dielectric inhomogeneity of the system in a longitudinal magnetic field. The dependences of the momentum relaxation rate and mobility on the wave number of CC, alloy concentration, radius of the wire, magnetic field induction and temperature are obtained for finite parabolic and rectangular confining potentials. The numerical estimations are made for a GaAs–Ga_{1-x}Al_xAs system.

УДК 533.9

СИСТЕМА ДИАГНОСТИКИ И КОНТРОЛЯ ПАРАМЕТРОВ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ ПУШКИ

Л.М. ПЕТРОСЯН

Ереванский физический институт им. А.Алиханяна

(Поступила в редакцию 20 марта 2006 г.)

Разработана и создана фотоэлектронная пушка для получения одиночных или двойных электронных сгустков пикосекундной длительности. Одним из важных узлов фотоэлектронной пушки является система диагностики и контроля параметров установки, которая обеспечивает контроль многих параметров в каждом импульсе, их оперативную обработку и строгую временную синхронизацию. Нами использована система DOOCS (Distributed Object Oriented Control System), разработанная в DESY для проекта TESLA.

1. Введение

В настоящее время резко возросла потребность в пикосекундных сильноточных пучках заряженных частиц высокой яркости, которые необходимы для эффективного использования ускорительных установок нового поколения и лазеров на свободных электронах (ЛСЭ).

В ЕрФИ была разработана и создана фотоэлектронная пушка для получения одиночных или двойных электронных сгустков пикосекундной длительности со следующими параметрами: энергия электронов 1 МэВ; длительность сгустков менее 100 пс; расстояние между сгустками 6-20 см; ток в первом сгустке до 100 А; ток во втором сгустке до 10 А.

Подобная временная структура электронных сгустков необходима при исследовании новых методов ускорения с помощью кильватерных волн в плазме. В этом методе первый (сильноточный) сгусток создает в плазме ускоряющее поле, которое ускоряет второй сгусток. Естественно, что для подбора необходимой фазы и эффективного ускорения второго сгустка, необходимо иметь возможность регулировать соотношение зарядов в сгустках и расстояние между ними.

Фотоэлектронная пушка является ускорителем прямого действия с питанием от высоковольтного импульсного источника, который представляет собой импульсный безжелезный трансформатор, помещенный в металлический бак с газом под давлением до 10 атм. Электронные сгустки заданной конфигурации получаются с помощью фотокатода, который облучается лазерными сгустками. Для формирования двойных лазерных импульсов используется система зеркал (аналогично интерферометру Майкельсона). Более подробное описание пушки приведено в работах [1,2].

При разработке фотоэлектронной пушки одним из центральных вопросов стало создание системы диагностики и контроля параметров. Необходимость эта обусловлена тем, что установка является системой, где требуется контроль многих параметров в каждом импульсе, их оперативная обработка и строгая временная синхронизация. Кроме того, в большинстве случаев использования фотоэлектронной пушки необходимо набирать статистику всех параметров в одном и том же импульсе, что определяет необходимость использования компьютерной контрольной системы, дающей возможность автоматической архивации данных для последующей их обработки.

2. Система контроля и диагностики

Блок схема установки приведена на рис.1. Все параметры установки можно разделить на две группы – быстрые (импульсные) и медленные (технологические).



Рис.1. Блок-схема комплекса.

Импульсные параметры:

1. Энергия лазерных сгустков. Измерение производится с помощью лавинных фотодиодов. Для этого используется отраженное излучение четвертой гармоники от поверхности прозрачной кварцевой пластины. Для отделения четвертой гармоники от сопровождающего видимого излучения перед фотодиодом ставится тефлоновая пленка, которая в то же время выполняет роль ослабителя, что необходимо для работы в линейной области фотодиода. Сигнал от фотодиода подается на формирователь для удлинения импульса. Длительность выходного сформированного прямоугольного импульса порядка двух микросекунд. Амплитуда импульса пропорциональна энергии импульса лазера, при этом

фронт импульса составляет не более 0,1 микросекунды, что важно для синхронизации работы лазера и высоковольтного напряжения пушки.

2. <u>Ток электронного пучка.</u> При пикосекундных длительностях обычно измеряется не ток, а заряд в сгустке. Даже в этом случае измерение весьма затруднено из-за малой величины заряда. При длительности сгустка порядка 30 псек и токе ~100 А величина заряда составляет всего 3 нК. Измерение заряда такой величины с помощью цилиндра Фарадея невозможно изза наводок высоковольтной системы ускорителя. Для измерений нами был использован органический сцинтиллятор с ФЭУ-30. Как известно, для отделения электронов от гаммаизлучения применяются тонкие сцинтилляторы, так как гамма-излучение свободно проходит через тонкий сцинтиллятор, а электроны поглощаются в нем. Поскольку энергия электронов составляла ~ 1 МэВ, нами был выбран сцинтиллятор толщиной ~1 мм. Калибровка производилась с помощью цилиндра Фарадея при максимальном токе пучка. Длительность выходного сформированного импульса не превосходила 10 мксек.

3. <u>Форма высоковольтного импульса</u>. Длительность импульса ~3 мксек. При частоте опроса АЦП 10 Мгц форма импульса контролируется с требуемой точностью. Сигнал берется от высоковольтного электрода через емкостной делитель.

Технологические параметры: 1) форвакуум, величина сигнала 0–5 В; 2) форвакуум, включение, величина сигнала 0 или 5 В; 3) Высокий вакуум, величина сигнала 0–5 В; 4) Высокий вакуум, включение, величина сигнала 0 или 5 В; 5) Охлаждение лазера, величина сигнала 0 или 5 В; 7) Высокое напряжение, величина сигнала 0–5 В.

Сигналы *да-нет* формируются с помощью реле и источника постоянного напряжения на 5В. Обмотка реле подключается параллельно к цепи питания контролируемой системы.

Два аналоговых сигнала (форвакуум и высокий вакуум) снимаются от вакуумметра ВИТ2 и с помощью усилителя постоянного тока усиливаются до 5В при предельном значении вакуума.

Нами была выбрана стандартная модель распределенной системы контроля, имеющая следующие основные характеристики: многоуровневая архитектура; использование сети для межуровневых взаимодействий; многоуровневый программный дизайн.

Логическая структура системы представлена на рис.2. В основном это трехуровневая модель. Первый уровень – удаленный операторский терминал, рабочая станция с клиентскими программами (операторский графический интерфейс). Второй уровень – сервисные приложения (сервер имен, машина состояний и т.п.). Приложения этого уровня могут быть запущены как на машине 1-го, так и 3-го уровней. Третий уровень – уровень контрольного оборудования. Все уровни взаимодействуют между собой через ethernet, через SUN-RPC (Remote Procedure Call).



Рис.2. Архитектура DOOCS.

Из широкого выбора коммерческих и открытых систем контроля была выбрана система DOOCS (Distributed Object Oriented Control System), разработанная в DESY для проекта TESLA [3-5]. Наш выбор определялся следующими причинами: открытый код с правом изменения; легкость перехода на свободные OS, к примеру LINUX; весьма дружественный API (Application Programming Interface) для разработки собственных приложений; гибкий графический интерфейс с возможностью online разработки клиентских приложений. Большое количество уже существующих программ для использования коммерческого VME оборудования и наличие различных библиотек дают возможность избежать низкоуровневого программирования, сконцентрировав внимание на самом контроле.

Каждое устройство имеет свой сервер. Имена серверов (IP адреса) определяются сервером ENS (Equipment Name Server). Разработаны серверы под все модули и драйвертаймер модуля, а также сервер ENS. В качестве клиентов используются SPARC и PC под SOLARIS 2.6-2.8, также используется возможность удаленного запуска клиентов с WINDOWS машин, используя Xwin сервер. Мониторинг данных возможен практически из любой точки интернета.

Мастер-импульс, сигнализирующий о начале очередного цикла работы установки кодируется в событие генератора тактовых импульсов (*clock*) и передается на таймер-модули вдоль установки. Таймер-модули генерируют триггеры запусков АЦП и прерывания для сервера АЦП, сервер считывает данные с устройств, архивирует их на локальном диске VME машины и при запросе отправляет данные по сети заинтересованным клиентам.

3. Система синхронизации

Синхронизация различных устройств системы контроля и самой установки основана на системе распределенных *СОБЫТИЙ*. В такой системе в определенных точках электрические сигналы (импульсы) кодируются в *СОБЫТИЯ* и пересылаются модулямдекодерам вдоль всей установки. Декодирующие модули декодируют *СОБЫТИЕ* в электрические сигналы с определенной изменяемой задержкой. Таким образом, определенное *СОБЫТИЕ*, возникшее в какой-либо части установки, видно во всех ее частях (рис.3).



Рис.3. Модуль clock-генератора и timer-модуль.

Система синхронизации состоит из *clock*-генератора и *timer*-модуля. *Clock*-генератор имеет 8 входов (TTL уровня) и специальный 8-битный регистр, кроме этого, вход для clock-а (9 МГц несущая) и выход clock. На вход clock подается 9 МГц несущая, все события, которые есть в clock, передаются на выход. При появлении сигнала на одном из 8-ми входов, в clock кодируется событие под номером входа с предшествующим "А". Таким же образом при записи какого-либо числа в регистр это число с предшествующим "S" кодируется в clock, приоритет отдается импульсным входам.

Таймер-модуль имеет вход clock и выход, clock передается на выход без изменения, имеет 8 выходов уровня TTL, 8 регистров события и 8 регистров задержки. Каждый выход конфигурируется на определенное событие и задержку (задержки можно устанавливать с шагом 110 нс).

Таймер-модуль декодирует события из clock, генерирует сигнал на выходе, сконфигурированном на данное событие с данной задержкой. Дополнительно таймер-модуль может генерировать прерывание шины VME, которое через драйвер модуля передается программному процессу в виде сигнала. Таким образом, событие можно передавать не только устройствам, но и программным процессам (к примеру, можно сигнализировать сервер АЦП о начале и конце считывания АЦП). Как правило, используется один clock-генератор, расположенный вблизи мастер-генератора, и несколько таймер- модулей вдоль всей установки.

Таким образом, создана система контроля фотоэлектронной пушкой, которая в настоящее время успешно работает и обеспечивает необходимый контроль над параметрами установки. Кроме того, система обеспечивает возможность увеличения числа контролируемых параметров.

ЛИТЕРАТУРА

- M.Petrosyan, M.Akopov, Yu.Garibyan, E.Laziev, R.Melikian, Yu.Nazaryan, M.Oganesyan, G.Petrosyan, L.Petrosyan, V.Pogosyan, G.Tovmasyan. "Photoelectron Gun for Formation of Systems of Bunches with Given Cofiguration". EPAC-2004, Abstract Brochure. Lucerne, Switzerland, 2004.
- M.Petrosyan, M.Akopov, Yu.Garibyan, E.Laziev, R.Melikian, Yu.Nazaryan, M.Oganesyan, G.Petrosyan, L.Petrosyan, V.Pogosyan, G.Tovmasyan. "Experiments on Wake Field Acceleration in Plasma and the Program of the Further Works in YerPhI". Proceedings PAC'05, Armenia, Yerevan, 2005.
- 3. **G.Grygiel, O.Hensler, K.Rehlich**. "DOOCS: A Distributed Object-Oriented Control System on PC's and Workstations", PCaPAC conference, 1996.
- 4. K.Rehlich. "An Object-Oriented Data Display for the TESLA Test Facility", ICALEPCS 97, Beijing.
- S.Goloborodko, O.Hensler, K.Rehlich. "Integration of LabVIEW into TTF Control System". Proceedings of the XV Workshop on charged particle accelerators, Protvino, 1996.

\$በ\$በէԼԵԿ\$ՐበՆԱՅԻՆ ԹՆԴԱՆበԹԻ ՊԱՐԱՄԵ\$ՐԵՐԻ ԴԻԱԳՆՈՍ\$ԻԿԱՅԻ ԵՎ ՎԵՐԱՀՍԿՄԱՆ ՀԱՄԱԿԱՐԳԸ

Լ.Մ. ՊԵՏՐՈՍՅԱՆ

ԵՖԻ-ում մշակվել եվ ստեղծվել է ֆ**ո**տոէլեկտրոնային պիկովարկյան տևողության թնդանոթ մեկ կամ զույգ էլեկտրոնային թանձրուկներ ստանալու համար։ Ֆոտոէլեկտրոնային թնդանոթի հիմնական հանգույցներից է պարամետրերի չափման և վերահսկման համակարգը, որը ապահովում է յուրաքանչյուր իմպուլսում պարամետրերի հսկումը, նրանց օպերատիվ մշակումն ու խիստ ժամանակային սինքրոնիզացիան։ Օգտագործվել է DOOCS (Distributed Object Oriented Control System) համակարգը, որը մշակվել է DESY-ում TESLA նախագծի համար։

DIAGNOSTIC AND CONTROL SYSTEM OF PHOTOGUN PARAMETERS

L.M. PETROSYAN

A photogun for production of single or double electron bunches of picosecond duration is developed and created in YerPhI. One of the basic parts of a photogun is the diagnostic and control system of parameters, which provides the control of many parameters over each pulse, their operative processing and strict time synchronization. The DOOCS System (Distributed Object Oriented Control System) developed in DESY for TESLA is used. УДК 539.1.07

ЭЛЕКТРОН-ПИОННОЕ РАЗДЕЛЕНИЕ В АДРОННОМ КАЛОРИМЕТРЕ ПРОЕКТА ATLAS

М.О. СИМОНЯН

Ереванский физический институт

(Поступила в редакцию 2 июня 2006 г.)

В Европейской Организации Ядерных Исследований (CERN), в преддверии запуска Большого Адронного Коллайдера (LHC), с энергией протонов 7+7 ТэВ в 2007 г., были проведены интенсивные исследования характеристик адронного калориметра проекта ATLAS [1] на вторичных пучках ускорителя SPS. В настоящей работе представлены данные по изучению эффективности различных экспериментальных методов электрон-пионного разделения и результаты их Монте-Карло моделирования в железно-сцинтилляционном калориметре [2] проекта ATLAS при энергии пучка 50–100 ГэВ.

1. Введение

Для решения основной массы физических задач, поставленных перед LHC, требуется высокая степень идентификации частиц, которая может быть достигнута только совместными усилиями участвующих в регистрации частей детектора ATLAS.

Методы e/π (электрон – π -мезон) разделения в калориметрии эксплуатируют в основном различие линейных масштабов электромагнитных и адронных ливней, определеляемых соответственно радиационной и ядерной длиной взаимодействия. Электромагнитные ливни более компактны и развиваются в небольшой части калориметра. Полный электрический отклик калориметра в общем случае также различен для электронов и адронов, что характеризуется его т.н. нескомпенсированностью [3]. Качество методов электрон-пионного разделения определяется выбором подходящего признака этих различий, что и обсуждается в настоящей статье. Методы электрон-пионного разделения разработаны в основном для калориметеров с тонкой структурой сегментации, которые менее эффективны для грубой сегментации, как это имеет место в случае адронного калориметра проекта ATLAS (TileCal). К сравнительному анализу предлагаются признаки электрон-пионного разделения, использованные ранее – полный электрический отклик калориметра (*E*), доля энергии в передней части калориметра (*C*) [4,5], число ячеек, вовлеченных в область формирования ливня (*Ncell*) [6,7], а также новые – максимальная (*MD*) и средняя (*AvD*) плотность энергии.

Максимальное разделение, которое может быть достигнуто с помощью калориметров, ограничено физическими процессами адронных ливней. Если зарядово-обменная реакция происходит при первых нескольких радиационных длинах и почти вся энергия передается

нейтральному мезону, который быстро распадается на два гамма-кванта, то чистый электромагнитный ливень будет сгенерирован и событие не может быть идентифицировано с помощью калориметров.

2. Экспериментальный метод, отбор событий, платформа моделирования

Схема эксперимента показана на рис.1. Вторичный пучок, на выводе Н8 ускорителя SPS, представляющий собой смесь позитронов, мюонов и адронов, проходил через систему триггерных счетчиков S1-S4, проволочных камер WPC1-4, газового черенковского счетчика С1 и регистрировался калориметром. Идентификация типа частиц на входе в калориметр первоначально осуществлялась по амплитудному спектру черенковского счетчика, заполненного гелием. Мюоны, теряющие энергию в основном на ионизацию, отделялись от адронов по малости их энерговыделения в секциях калориметра. Для каждого события регистрации частицы проверялось соответствие ее координат на камерах апертуре ядра пучка. Для отсечения событий прохождения кластера из двух и более заряженных частиц энерговыделение в счетчиках S1-S4 должно было соответствовать одночастичным ионизационным потерям. Генерация случайных триггеров в промежутке между выводами пучка позволяла определить спектр шумов от фотодетекторов и электроники и, соответственно, выставлять пороги на уровне трех стандартных отклонений. Схема сегментации модуля центральной части калориметра в плоскости rz (r – радиус-вектор аксиальносимметричной конфигурации калориметра, z – вектор оси пучка) показана на рис.2. Она отражает величину грануляции ячеек $\Delta \eta$ =0.1 по псевдобыстроте (η =–ln tg θ /2) и секционирование вдоль радиуса в глубину (секции A, BC и D).



Рис.1. Схема экспериментальной установки.

Признак С определялся как энерговыделение в первых двух секциях калориметра, нормированное на энергию пучка:

$$C = \sum_{j}^{Samplings1,2} E_j / E_{beam}$$

а средняя плотность энергии:

$$AvD = (\sum_{i}^{Ncell} E_i / V_i) / Ncell$$
,

где E_i и V_i – соответственно, энергия и объем ячейки с номером *i*. Число ячеек, вовлеченных в определение признаков *C*, *Ncell* и *AvD* выявлялось по превышению порога энерговыделения в 0.05 pC и 1% от полной энергии, соответственно. Максимальная плотность *MD* определялась по максимуму отношения E_i/V_i при сканировании по ячейкам, вовлеченным в область формирования ливня.

D-3		D-2			D-1			D0			D1			D2			D3		
BC-8	BC-7	в	C-6	BC-5	BC-4	BC-:	3 вс	;-2	BC-1	BC1	в	C2	всз	BC4	BC	5 В	C6 I	3C7	BC8
В-9											ſ	ſ	ſ				1		В9
A-10	A-9	A-8	A-7	A-6	A-5	A-4	A-3	A-2	A-1	A1	A2	A3	A4	A5	A6	A7	A8	A9	A10

Рис.2. Сегментация калориметра, геометрия ячеек.

Моделирование эксперимента, включающее регистрацию позитронов и *п*-мезонов, проводилось в рамках платформы ATHENA-11.0.1, специально разработанной для детектора ATLAS на основе пакета GEANT4 (geant4-07-01) [8], и списком физических процессов QGSP_GN 2.6. Вклад шумов добавлялся и обрабатывался, имитируя реальные экспериментальные условия.

3.Анализ данных и сравнение с результатами моделирования

анализа использованы экспериментальные данные, полученные Для при псевдобыстроте $\eta = -0.35$, близкой к условиям минимальной грануляции калориметра. Как отмечалось выше, нескомпенсированность калориметра позволяет в определенной степени различать электроны и пионы по полному отклику калориметра. С учетом того, что разрешение калориметра пропорционально $E^{1/2}$, а доля энергии адронного ливня, выделяемой в электромагнитных распадах нейтральных мезонов, растет как $\ln(E)$, то e/π разделение по полному отклику улучшается с ростом энергии. Этот же феномен наблюдается и по другим признакам e/π разделения и поэтому, в целях ограничения объема статьи, мы ограничимся представлением данных только при энергии *E* = 50 ГэВ. На рис.3-7 показаны экспериментальные распределения признаков *e*/*π* разделения по полной энергии *E*, *Ncell*, *MD*, *AvD* и *C*, совместно с результатами их Монте-Карло моделирования. Как видно из рисунков, общим в спектре распределения всех признаков является присутствие двух максимумов, соответствующих электронным и пионным событиям. Уже чисто качественно можно заметить, что наилучшую степень e/π разделения обеспечивает признак усредненной плотности AvD, а наихудшую – разделение по полному отклику.



Рис.3. Распределение Е.



Рис.4. Распределение Ncell.



Рис.5. Распределение МД.



Рис.6. Распределение АvD.



Рис.7. Распределение С.

Количественно эффективность *e*/π разделения представлена на рис.8-9. Анализируя качество моделирования данных, представленных на рис.4, можно видеть, что в целом электронная часть распределений описывается лучше, чем пионная, которая представлена и отдельно на рисунках. Из рис.4 заметен сдвиг Монте-Карло описания относительно пионных экспериментальных данных, что указывает на более компактную структуру моделируемых адронных ливней. В связи с этим обстоятельством, мы использовали гауссовское распределение для описания пионного распределения в области перекрытия спектров от электронов и пионов. Синтезированное таким образом суммарное описание признаков е/п разделения достаточно хорошо описывает экспериментальные данные. В случае МД моделирование хорошо описывает экспериментальные данные и с помошью вариации весов электронной и пионной частей получено хорошее описание признака.



Рис.8. Эффективность разделения пионов.

Рис.9. Эффективность разделения электронов.

Эффективность *e*/*π* разделения определялась по числу электронных (пионных) событий, выживающих после выставления порога в спектре соответствующего признака. Варьируя величину порога, были получены зависимости содержания пионов (электронов) в спектре электронов (пионов) от эффективности, которые показаны на рис.8 и 9 с использованием представленных выше признаков.

Как видно из рисунков, признак AvD обеспечивает наилучшее качество e/π разделения: при 99% эффективности отбора пионных событий содержание электронов не превышает 0.1% и при 99% эффективности отбора электронных событий содержание пионов не превышает 0.15%. Следует отметить, что применение признака C_i оказывается значительно менее эффективным при привязке к полному энерговыделению, а не к энергии пучка.

4. Заключение

В настоящей работе детально проанализировано *е*/*π* разделение в адронном калориметре проекта ATLAS. Наилучшая эффективность получена с применением признака

AvD. Экспериментальные распределения сравнены с результатами Монте-Карло моделирования, которые менее достоверно описывают структуру адронных ливней по сравнению с электромагнитными. Эти результаты востребованы и для улучшения качества Монте-Карло моделирования на основе GEANT4.

В заключение автор выражает искреннюю признательность своему научному руководителю Г.Акопяну за предложение темы и помощь, гранту INTAS для молодых ученых No.04-83-2605, членам коллаборации ATLAS –T.Carli, A.Henriques за помощь и полезные обсуждения, руководителю коллаборации P.Jenni за личную поддержку на начальном этапе работы по проекту.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. ATLAS Collaboration, Technical Design Report, CERN-LHCC, 94-93, CERN, Geneva, Switzerland. 1994.
- 2. ATLAS Collaboration, Tile Calorimeter Technical Design Report, CERN-LHCC, 96-42, 1996.
- 3. **R.Wigmans**. Calorimetry-Energy Measurement in Particle Physics, International Series of Monographs on Physics, vol.107, Oxford University Press, Oxford, 2000.
- 4. B.Andrew et al. Nucl. Instr. Meth., A344, 492 (1994).
- Y.A.Kulchitsky, M.V.Kuzmin, V.B.Vinogradov. Electron calibration of the TILECAL Module Cells, ATL-TILECAL-2001-002.
- 6. **D.Acosta** et al. Nucl. Instr. Meth., **A302**, 36 (1991).
- 7. H.Hakopian, V.Grabsky. The pion in the *z*-direction. ATL-TILE-TR-41, Analysis meeting of the test beam data, 27 June, 1995.

8. J.Agostinelli et al. Nucl. Instr. Meth., A506, 250 (2003).

էԼԵԿՏՐՈՆ-ՊԻՈՆ ԲԱԺԱՆՈՒՄԸ ATLAS ՆԱԽԱԳԾԻ ՀԱԴՐՈՆԱՅԻՆ ԿԱԼՈՐԻՄԵՏՐՈՒՄ

Մ.Օ. ՍԻՄՈՆՅԱՆ

Միջուկային Հետազոտությունների Եվրոպական Կազմակերպությունում (CERN) 2007 թ-ին 7+7 ՏէՎ պրոտոնների էներգիայով Մեծ Հադրոնային Կոլայդերի (LHC) գործադրման շեմին, անց են կացվել ATLAS նախագծի հադրոնային կալորիմետրի առանձնահատկությունների ինտենսիվ հետազոտություններ SPS արագացուցչի երկրորդային փնջերի վրա։ Տվյալ աշխատանքում ներկայացված են ATLAS նախագծի երկաթ-սցինտիլլատոր կալորիմետրում էլեկտրոն-պիոն բաժանման տարբեր փորձնական մեթոդների արդյունավետության ուսումնասիրման տվյալները և նրանց Մոնտե-Կառլո մոդելավորման արդյունքները 50-180 ԳէՎ էներգիայով փնջի համար։

ELECTRON-PION SEPARATION IN THE HADRON CALORIMETER OF ATLAS PROJECT

M.O. SIMONYAN

On the threshold of the start-up of Large Hadron Collider (LHC) with the protons energy of 7+7 TeV in 2007, at European Organization for Nuclear Research (CERN) intensive researches of hadronic calorimeter characteristics of ATLAS project [1] were carried out on the secondary beams of the SPS accelerator. In the present work, data on the study of effectiveness of different experimental methods of electron – pion separation and the results of their Monte-Carlo simulation in iron-scintillator calorimeter of ATLAS project [2] with the beam energy of 50-180 GeV are presented.

УДК 548.732

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ИСКУССТВЕННАЯ АНИЗОТРОПИЯ КРИСТАЛЛОВ В ОБЛАСТИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЧАСТОТ

Л.Г. ГАСПАРЯН, В.П. МКРТЧЯН, М.К. БАЛЯН, А.Г. ГРИГОРЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 17 января 2006 г.)

Впервые экспериментально обнаружено явление температурной искусственной анизотропии кристаллов в области рентгеновских частот и сделана попытка теоретически объяснить проявление этого явления при брэгг-лауевской дифракции. Установлено, что изотропный кристалл становится в оптическом отношении искусственно анизотропным, подобным одноосному кристаллу с оптической осью вдоль направления приложенного внешнего воздействия, являющегося осью симметрии, что и приводит к двойному лучепреломлению.

Динамическая теория дифракции рентгеновских лучей показывает, что вблизи полного отражения на совершенном кристалле часть энергии проникает внутрь кристалла и распространяется по вполне определеннной траектории, являющейся функцией угла падения [1,2]. В работе [3] экспериментально доказано существование этого явления. Найдены выражения для интенсивностей пучков, выходящих из торцевой поверхности кристалла для поглощающего и непоглощающего кристаллов, соответственно [4,5]. В работе [6] рассмотрено явление дифракции в конечных кристаллах для симметричной и асимметричной геометрии дифракции, а в [7-10] исследовано влияние ультразвука и температурного градиента на дифракцию и модуляцию рентгеновских волн.

В настоящей работе исследовано влияние внешнего воздействия (температурный градиент) на поток энергии, дифрагированной по Брэггу. Исследования подобного рода важны, поскольку аномально проходящий пучок в случае Брэгга можно использовать для исследования межатомных решеточных дефектов, для измерения решеточных параметров таких кристаллов, которые подвергнуты ионной имплантации или поверхность которых имеет разные решеточные параметры. В этом случае решеточные параметры поверхности, подвергнутой внешним воздействиям, можно определить, измеряя смещение между максимумами отражения пучков, дифрагированных от поверхности кристалла и от торцевой части.

В связи с тем, что полупроводниковые приборы часто работают в условиях внешних воздействий, представляет интерес также исследование влияния ультразвуковых колебаний и температурного градиента на брэгг-лауэвское (БЛ) отражение рентгеновских лучей, т.е. исс-

ледование пучков, выходящих из торцевой поверхности монокристалла в зависимости от внешних воздействий.

Для исследования влияния температурного градиента на БЛ отражение рентгеновских лучей опыты проводились следующим образом. Образец, который был вырезан из бездислокационного кристалла кремния, имел вид пластинки, большая поверхность которой (110). Этот образец большой стороной прикреплялся к специально изготовленному металлическому резервуару, через который подавалась вода для охлаждения прикрепленной стороны. Образец с подставкой устанавливался на второй головке двухкристальной камеры. Температурный градиент создавался за счет того, что один конец образца охлаждался проточной водой, а другой конец нагревался с помощью нагревателя (см. рис.1). Таким образом, на краях образца поддерживалась постоянная разность температур. Температура измерялась с помошью медьконстантановой термопары. Один конец термопары постоянно держался при температуре 0°С, а другой конец поочередно прижимался к краям образца.



Рис.1. а) Образец с подставкой, b) схема эксперимента.

После отражения от асимметричного монохроматора лентообразный параллельный пучок рентгеновских лучей падал на поверхность образца AB, и после симметричной дифракции в образце снимались кривые качания пучков 1,2 и 3. Измерения проводились для разных значений температурного градиента, результаты приведены в таблице 1.

Как показали опыты, с увеличением температурного градиента максимальные значения кривых качаний пучков 1,2 и 3 уменьшаются, полуширина кривых качаний увеличивается, а угловое смещение между брэгговским и лауэвскими отражениями уменьшается. Например, при отсутствии градиента ($\Delta T = 0$ K) смещение указанных пучков составляло 2,5". При $\Delta T = 9$ K смещение было равно 1", а при $\Delta T = 29$ K 0,5". При дальнейшем увеличении температурного градиента (например, при (T = 49 K) наблюдалось расщепление кривой качания пучка 3, т.е. появление дублета (двух максимумов одинаковой

интенсивности) на этой кривой (см. рис.2).

Табл.1. $\delta_{1,2}$ и δ_3 – полуширины кривых качания лауэвских и брэгговских отражений, соответственно; Δ – смещение между максимумами кривых качания брэгговского и лауэвского отражений.

$\Delta T(\mathbf{K})$	<i>б</i> 1,2(сек.)	<i>б</i> з(сек.)	Δ(сек)	<i>I</i> _{1,2max} (имп./сек)	<i>І</i> з _{тах} (имп./сек)	<i>І</i> з _{тіп} (имп./сек)
0	2,0	3,0	2,5	6·10 ²	7·10 ³	I
6	2,0	3,0	2,0	6·10 ²	7·10 ³	-
9	2,0	3,0	1,0	6·10 ²	7·10 ³	-
19	2,2	3,4	0,7	5,6·10 ²	5,5·10 ³	-
29	2,4	4,0	0,5	5,3·10 ²	4,5·10 ³	I
41	2,6	5,0	0	4,6·10 ²	4,0·10 ³	3,5·10 ³
49	3,0	6,0	0	4·10 ²	3,5·10 ³	2,5·10 ³



Рис.2. Кривые качания пучков 1,2 и 3 при ΔT = 49 К.

При этом происходило совпадение максимума кривой качания пучка 1 с минимумом кривой качания пучка 3. Отметим также, что кривая качания 3 симметрична относительно точки минимума в области расщепления, а расстояние между максимумами увеличивается с увеличением ΔT . Таким образом, при больших значениях температурного градиента угловое смещение между брэгговским и лауэвскими отражениями исчезает.

Результаты проведенных экспериментов объяснить в пределах динамической теории оказалось невозможным. Было сделано предположение, что под действием внешнего воздействия (температурный градиент) изотропный кристалл становится в оптическом отношении искусственно анизотропным (явление, хорошо известное в оптике), подобным одноосному кристаллу с оптической осью вдоль направления приложенного внешнего воздействия, являющегося осью симметрии. На основании этого предположения попытаемся объяснить поведение качаний пучков 1,2 и 3. Согласно динамической теории, угол Брэгга брэгговски-отраженного пучка 3 отклонен от кинематического угла Брэгга на $\chi_0/2 \sin 2\theta$, где χ_0 – общая нулевая Фурье-компонента поляризуемости для волн σ - и π -поляризаций. При наличии анизотропии имеем $\chi_{0\sigma}/2\sin 2\theta$ и $\chi_{0\pi}/2\sin 2\theta$ для σ - и π -поляризаций, соответственно. Пока чувствительность опыта не позволяет различить эти максимумы, явление проявляется расширением кривых качаний, а начиная с определенных значений температуры (см. рис.2) максимумы кривых качаний разделяются, давая для каждой поляризации соответствующее положение максимума. На рис.3 приведена экспериментально полученная зависимость ширины кривой качания от температурного градиента.



Рис.3. Зависимость ширины кривой качания брэгговски отраженного пучка 3 от температурного градиента.

Как и в оптике при воздействии электрического поля (эффект Кэрра), эта зависимость приблизительно представляется параболой. Что касается пучков, выходящих из торцевой поверхности кристалла, то в результате полного поглощения *π*-поляризации они будут только *σ*-поляризованы и их кривые качания вследствие искусственной антизотропии будут смещаться в сторону максимума кривой качания *σ*-поляризации брэгговски отраженного пуч-

ка 3. Отсюда можно сделать вывод, что левая компонента расщепленной кривой качания брэгговски отраженного пучка 3 (рис.2), в сторону которой смещаются максимумы кривых качаний пучков, выходящих из торцевой поверхности 1 и 2, соответствует *о*-поляризации.

Обобщая вышеприведенные результаты, приходим к следующим выводам.

1. При сочетаниях брэгг-лауэвских геометрий отражений, когда на кристалл падает плоская волна, качание кристалла приводит к возникновению трех пучков.

2. Между максимумами кривых качаний этих компонент существует угловое отклонение ≈2,5". Лауэвские компоненты возникают вследствие малости дифракционного коэффициента поглощения в окрестности точки *p* = +1 и только *σ*-поляризованы.

3. При наличии температурного градиента в кристалле, угловое смещение между брэгговским и лауэвскими отражениями уменьшается с увеличением величины температурного градиента.

4. Начиная с некоторых больших значений температурного градиента, наблюдается расщепление кривой качания брэгговского отражения.

ЛИТЕРАТУРА

1. H.Wagner. Z. Physik, 146, 127 (1956).

- 2. M. von Laue. Rontgenstrahlinterferenzen. Frankfurt/M., 1960.
- 3. G.Borrmann, G.Hildebrandt, H.Wagner. Z. Physik, 142, 406 (1955).
- 4. **A.Authier**. Le Journal de Physique et le Radium, **23**, 961 (1962).
- 5. G.J.Wach. Phys. Lett. A, 121, 45 (1987).
- 6. G.Thorkidsen, H.B.Larsen. Acta Cryst., A 54, 416 (1998); ibid, A 55, 1 (1999).
- 7. E.Zolotoyabko, B.Sander. Acta Cryst., A 51, 897 (1995).
- 8. E.M.Iolin. Acta Cryst., A 51, 897 (1995).
- 9. K.D.Liss, A.Magerl, A.Rehof, R.Hock. Acta Cryst., A 53, 181 (1997).
- 10. M.Hecker, W.Pitschke, D.Tietjen, C.M.Schneider. Thin Solid Films, 411, 234 (2002).

ARTIFICIAL TEMPERATURE ANISOTROPY OF CRYSTALS IN THE RANGE OF X-RAY FREQUENCIES

L.G. GASPARYAN, V.P. MKRTCHYAN, M.K. BALYAN, A.H. GRIGORYAN

For the first time the phenomenon of artificial temperature anisotropy is revealed in the range of X-ray frequencies and an attempt is made to give a theoretical explanation of this phenomenon in the case of the Bragg-Laue diffraction. It is established that an isotropic crystal optically becomes artificially anisotropic like an uniaxial crystal with the optical axis along the direction of an applied external excitation as a symmetry axis, which leads to the birefringence.

УДК 573.3

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ СТАБИЛЬНОСТИ ДНК ПРИ МЕЖЦЕПОЧЕЧНОМ СШИВАНИИ ОБЛУЧЕНИЕМ

В.И. ВАРДАНЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 24 мая 2006 г.)

Разработан теоретический метод компьютерного моделирования кривых плавления сшитых ДНК. В методе учитывается, что в точке сшивания двойная спираль ДНК может быть полностью расплавлена при повышении температуры, но нити ДНК при этом не могут разделяться. На основании полученных результатов обсуждаются экспериментальные данные по УФ-, α - и *у*-облучению растворов ДНК.

1. Введение

УФ-, у- и α -облучение вызывают различные модификации в структуре ДНК: однонитевые и двунитевые разрывы, внутрицепочечные и межцепочечные сшивки, а также монофункциональные аддукты. Разрывы дестабилизируют структуру ДНК и снижают ее температуру плавления (T_m). Межцепочечные сшивки увеличивают T_m . Однако, известно, что при УФ-облучении формирование межцепочечных сшивок является редким событием, и их концентрация в сотни раз ниже, чем внутрицепочечных сшивок, образующихся между соседними основаниями тимина [1,2]. Некоторые ионы металлов усиливают формирование сшивок, вызванное *у*- и УФ-облучением [3]. Известно также, что низкие дозы *у*- и α облучения увеличивают стабильность ДНК (температуру плавления, T_m), а более высокие дозы уменьшают ее [4-6]. Для объяснения этих экспериментальных данных нами разработан теоретический метод расчета кривых плавления сшитых ДНК. В методе учитывается, что в точке сшивания двойная спираль ДНК может быть полностью расплавлена при повышении температуры, но нити ДНК при этом не разделяются.

2. Обозначения, используемые в работе

Обозначения, используемые в этой работе, являются модификацией обозначений Поланда [7] и Фиксмана-Фраери [8]. Данная модификация лучше описывает сшитую ДНК. Ниже приводится список основных обозначений и простых соотношений.

N-число пар оснований (звеньев) в ДНК; при расчетах в этой работе использовалось N=5000 пар оснований (п.о.).

 $r(m) = \exp[-(\Delta H_m - T \cdot \Delta \Delta S_m)/(RT)] = \exp[-\Delta s_m \cdot (\tau m - T)/(RT)] -$ статистический вес расплав-

ленной пары с номером m, где m = 1÷ N. $\Delta\Delta H$ m, $\Delta\Delta$ Sm > 0 – изменения энтальпии и энтропии звен*а* m при переходе спираль-клубок; эти параметры изменяются после модификации пары номе*р* m. T – температура (K); R – газовая постоянная. Для немодифицированных AT- и GC-пар температуры плавления их гомополимеро*в* Tm, соответственно, равн*ы тAT* = 65,2°C *и r*GC = 107,8°C [9]. Δ Sm = 24,85 кал/(моль·K) – изменение энтропии на одну немодифицированную пару оснований при плавлении молекулы ДНК [9]

Статистический вес спиральной пары предполагается равным единице.

σ= 5·10⁻⁵ – значение фактора кооперативности плавления ДНК (т.е. статистический вес двух границ внутренней расплавленной области, образующей петлю).

 $\sigma(m,j) = \sigma_l(m) \cdot \sigma_r(j)$ – модифицированная форма фактора кооперативности плавления ДНК, где $\sigma_l(m)$ и $\sigma_r(j)$ являются статистическими весами левой и правой границы расплавленного участка, которые могут различаться из-за химической модификации. *m* является номером последнего спирального звена перед расплавленным участком и *j* является номером последнего звена этого участка. Если звенья *m* и *j* не содержат химической модификации, то $\sigma_l(m) = \sigma_r(j) = \sqrt{\sigma}$.

 $\delta(m) = (m+d)^{-\alpha}$ – петлевой фактор внутренней расплавленной области длиной *m*, не содержащей сшитых пар оснований; *d* – эмпирический параметр жесткости [8]. При расчетах использовались значения $\alpha = 1,7$ и d = 1 [8,9].

 β – фактор первичной ассоциации цепей (параметр инициирования спирали, которое сопровождается возникновением двух энергетически невыгодных границ между первым спиральным участком и правым и левым расплавленными концами).

 ω – число сшивок, расположенных на звеньях с номерами $n_1,n_2,...,n_\omega.$

 $\delta(0)$ – энтропийный фактор петли, образованной двумя сшивками, расположенными на соседних парах расплавленного участка, или сшивкой на расплавленной паре, смежной со спиральной. Расплавленный участок из одной сшитой пары включает две такие петли и его петлевой фактор равен $\delta(0)^2$.

P(m) – условная вероятность того, что звено (m+1) является спиральным, если звено m спирально $(m = 1 \div (N-1))$. $t(m) = P(m) \cdot r(m)$ – вспомогательный параметр, $\rho(m)$ – безусловная (априорная) вероятность того, что звено m является спиральным для состояний макромолекул ДНК, содержащих хотя бы одно спиральное звено $(m = 1 \div (N-1))$.

L – общее число молекул ДНК в растворе; L_2 – число молекул ДНК, содержащих хотя бы одно спиральное звено. N_2 – среднее число спиральных звеньев в молекулах ДНК, содержащих хотя бы одно спиральное звено, т.е. в частично расплавленных молекулах. C_t – общая молярная концентрация цепей ДНК.

 $v_{int} = N_2 / N$ – средняя степень спиральности молекул ДНК, содержащих хотя бы одно спиральное звено. Очевидно, что $v_{int} = N^{-1} \cdot \sum_{k=1}^{n} \rho(k)$.

 $v_{ext} = L_2 / L$ – доля молекул ДНК, содержащих хотя бы одно спиральное звено; (1- v_{ext}) является долей полностью расплавленных молекул. $v = L_2 N_2 / LN = v_{int} \cdot v_{ext}$ – общая степень спиральности.

 $P_{hel} = \rho(1) \cdot \prod_{k=1}^{m} P(k)$ – вероятность того, что молекула ДНК содержит только спиральные пары оснований.

3. Алгоритм вычислений

Для расчета кривой плавления, т.е. зависимости степени спиральности от температуры необходимо найти v_{ext} и v_{int} .

Для линейных немодифицированных и химически модифицированных ДНК без межцепочечных сшивок цепи полностью расходятся после плавления. Диссоциация описывается параметром ϑ_{ext} , т.е. долей молекул, содержащих спиральные пары. $(1 - \vartheta_{ext})$ является долей полностью расплавленных молекул. При использовании результатов работы [10] получим выражения (1),(2) для равновесной константы ассоциации нитей ДНК *K* и вспомогательного параметра *F*, соответственно, для несамокомплементарных цепей ДНК [реакция ассоциации $S_1 + S_2$ (S_{12} при условии $[S_1] = [S_2] = (1 - \upsilon_{ext}) \cdot C_t / 2]$ и самокомплементарных цепей [реакция ассоциации $2S_1 \leftrightarrows S_{11}$]:

$$K = \frac{[S_{12}]}{[S_1] \cdot [S_2]} = \frac{C_t \cdot \vartheta_{ext} / 2}{[C_t \cdot (1 - \vartheta_{ext}) / 2]^2} = \frac{2 \cdot \vartheta_{ext}}{(1 - \vartheta_{ext})^2 \cdot C_t}; \quad F = \frac{1 + K \cdot C_t}{K \cdot C_t},$$
(1)

$$K = \frac{[S_{11}]}{[S_1]^2} = \frac{C_t \cdot \vartheta_{ext} / 2}{[C_t \cdot (1 - \vartheta_{ext})]^2} = \frac{\vartheta_{ext}}{2 \cdot (1 - \vartheta_{ext})^2 \cdot C_t}; \quad F = \frac{1 + 4K \cdot C_t}{4 \cdot K \cdot C_t}.$$
 (2)

Из выражений (1) и (2) следует, что для обоих типов цепей ДНК

$$\vartheta_{ext} = F - \sqrt{F^2 - 1} \,. \tag{3}$$

Если в цепи ДНК имеются межцепочечные сшивки, то диссоциация цепей отсутствует, и реакция ассоциации имеет вид $S_{o1} \leftrightarrows S_{o2}$, независимо от типа цепей, где $[S_{o1}] = (1 - v_{ext}) \cdot C_t / 2], [S_{o2}] = v_{ext} \cdot C_t / 2$. Отсюда следует, что

$$K = \frac{[S_{o2}]}{[S_{o1}]} = \frac{C_t \cdot \vartheta_{ext}/2}{C_t \cdot (1 - \vartheta_{ext})/2} = \frac{\vartheta_{ext}}{(1 - \vartheta_{ext})} \quad \text{if} \quad \vartheta_{ext} = K/(1 + K) .$$

$$\tag{4}$$

Для дальнейших вычислений необходимо определить константу K, которая равна отношению суммы статистического веса нерасплавленного состояния и всех частично расплавленных состояний (Z_{int}) к статистическому весу полностью расплавленного состояния (q(N)):

$$K = Z_{int} / q_l(N) \,. \tag{5}$$

Выражение для статистического веса состояний, содержащих хотя бы одно спиральное звено (Z_{int}), можно найти через вероятность полностью спирального состояния молекулы ДНК по отношению ко всем не полностью расплавленным состояниям (P_{hel}). Эта вероятность равна отношению статистического веса полностью спирального состояния (который равен 1) и статистического веса всех не полностью расплавленных состояний (Z_{int}), т.е. $P_{hel} = 1/Z_{int}$. С другой стороны, согласно [7]

$$P_{hel} = \rho(1) \cdot \prod_{k=1}^{N-1} P(k) .$$
(6)
Отсюда следует, что

$$Z_{int} = \left[\rho(1) \cdot \prod_{k=1}^{N-1} P(k)\right]^{-1}$$

Следовательно, для всех рассмотренных типов ДНК (несамокомплементарных, самокомплементарных и сшитых)

$$K = \beta \cdot \left\{ \left[\rho(1) \cdot \prod_{m=1}^{N-1} P(m) \right] \cdot \delta_l(N) \prod_{k=1}^{N} r(k) \right\}^{-1}.$$
 (7)

Найдем P(m) и $\rho(m)$, необходимые для расчета v_{int} и v_{ext} . Как и в подходе Поланда [7] (разработанном для несшитой ДНК), в случае молекулы сшитой ДНК с заданной последовательностью природных и модифицированных нуклеотидов, для расчета v_{int} необходимо вычислить (*N*-1) условных вероятностей (P(m)) того, что звено m+1 спирально при условии спиральности звена с номером m, а также N безусловных вероятностей $\rho(m)$ того, что звено m находится в спиральном состоянии, и (*N*-1) вспомогательных параметров $t(m)=t(m) \cdot P(m)$. С этой целью рассмотрим плавление цепи ДНК из N звеньев, которые пронумерованы слева направо: m = 1, 2, ..., N. В цепи ДНК имеется ω межцепочечных сшивок, которые расположены на звеньях с номерами m, $m_2, ..., n$. Кроме того, имеются монофункциональные аддукты и внутрицепочечные сшивки, также образованные облучением, которые вызывают соответствующее изменение t(m).

Для внутреннего расплавленного участка (ограниченного спиральными парами с обоих концов), который включает *и* сшивок, энтропийный петлевой фактор может быть выражен как произведение энтропийных факторов простых петель $\delta(L_k) = (d + L_k)^{-\alpha}$, где $L_k -$ длина *k*-ой простой петли. Пусть $\delta_l(m, j)$ являются петлевыми факторами внутреннего расплавленного участка, который начинается после спирального звена с номером *m* и его последнее (расплавленное) звено имеет номер *j*, т.е. *j*-*m* является длиной рассматриваемого участка. $\delta_l(j)$ является петлевым фактором левого расплавленного конца, последнее (расплавленное) звено которого имеет номер *j*, т.е. длина участка равна *j*. $\delta_l(m)$ – петлевой фактор правого расплавленного конца ДНК, который начинается после спирального звена с номером *m* и продолжается до конца цепи. Длина этого участка равна *N*-*m*.

Внутренний расплавленный участок, не содержащий сшивок, формирует одну простую петлю, для которой $\delta_l(m, j) = \delta(n)$, где $\delta(n)$ – энтропийный фактор для петли длиной в n = j - m звеньев. Расплавленные концы при отсутствии сшивок не образуют петель и поэтому $\delta_l(j) = \delta_r(m) = 1$. Монофункциональные аддукты и внутрицепочечные сшивки слабо меняют величину петлевого фактора заданной длины. Однако, межцепочечные сшивки, формируя дополнительные петли, существенно изменяют петлевые факторы всех трех типов участков, и это необходимо учесть в теории. Для расплавленного участка, который включает n расплавленных пар (u из них содержат межцепочечные сшивки), энтропийный фактор можно выразить через энтропийные факторы простых петель:

$$\delta_I(m,j) = \prod_{k=1}^{u+1} \delta(L_k); \qquad n = j - m,$$

$$\delta_l(j) = \prod_{k=1}^u \delta(L_k); \quad n = j ,$$

$$\delta_r(m) = \prod_{k=1}^u \delta(L_k); \quad n = N - m .$$
(8)

Для сшитой ДНК выражения (24) работы [7] изменим следующим образом:

$$q_l(j) = [\sigma_r(j)/\sqrt{\sigma}] \cdot \delta_l(j) \cdot \prod_{k=1}^j r(k);$$
(9)

$$q_l(N) = \beta^{-1} \cdot \delta_l(N) \cdot \prod_{k=1}^N r(k) , \qquad (10)$$

$$q_r(m) = [\sigma_l(m)/\sqrt{\sigma}] \cdot \delta_r(m) \cdot \prod_{k=m+1}^N r(k);$$
(11)

$$q_I(m, j) = [\sigma_I(m) \cdot \sigma_r(j)] \cdot \delta_I(m, j) \cdot \prod_{k=m+1}^{J} r(k), \qquad (12)$$

где r(k), β , $\sigma_l(m)$ $u \sigma_r(j)$ описаны выше, (q_l) , (q_r) и (q_l) – статистические веса расплавленных левого конца, правого конца и внутренних последовательностей, а $\delta_l(j)$, $\delta_l(m, j)$, $\delta_r(m)$ заданы выражениями (8).

Подставляя $q_l(j)$ и $q_l(m, j)$ из наших выражений (5) в выражение (4) из работы [7], можно получить выражения (13)-(16) вместо выражений (26), (27) в работе Поланда [7] и вместо выражений Фиксмана–Фраери (2)-(4) в [8], полученных для ДНК без сшивок:

$$t(N-1) = \begin{cases} r(N-1) \cdot \{1 + [\sigma_l(N-1)/\sqrt{\sigma}] \cdot r(N)\}^{-1} & \text{при} \quad n_{\omega} \neq N, \\ r(N-1) \cdot \{1 + [\sigma_l(N-1)/\sqrt{\sigma}] \cdot r(N) \cdot \delta(0)\}^{-1} & \text{при} \quad n_{\omega} = N, \end{cases}$$
(13)

$$t(m) = r(m) \cdot \{1 + \sigma_l(m) \cdot [Q(m) + \beta(m)/\sqrt{\sigma}]\}^{-1}, \quad m = N - 2, \dots, 1,$$
(14)

где

$$Q(N-1) = 0; \quad Q(m) = \sum_{j=m+1}^{N-1} \sigma_r(j) \cdot \delta_I(m,j) \cdot \prod_{k=m+1}^j t(k), \quad (15)$$

$$\beta(N-1) = \begin{cases} r(N) & \text{При} \quad n_{\omega} \neq N \\ r(N) \cdot \delta(0) & \text{При} \quad n_{\omega} = N \end{cases} \quad \beta(m) = \delta_r(m) \cdot r(N) \cdot \prod_{k=m+1}^{N-1} t(k) \,. \tag{16}$$

Выразим Q(m) в терминах простых петель ($\delta(n)$). Если $m \ge n_{\omega}$, то межцепочечные сшивки не влияют на Q(m), которое остается таким же, как и в случае немодифицированной ДНК:

$$Q(m) = \sum_{j=m+1}^{N-1} \sigma_r(j) \cdot \delta(j-m) \cdot \prod_{k=m+1}^{j} t(k) .$$
(17)

Если $m = n_i - 1$, то Q(m) задается выражением:

$$Q(n_{i}-1) = t(n_{i}) \cdot \sigma_{r}(n_{i}) \cdot \delta(0)^{2} + t(n_{i}) \cdot \delta(0) \cdot \left[\sum_{j=n_{i}+1}^{N-1} \sigma_{r}(j) \cdot \delta_{I}(n_{i},j) \cdot \prod_{k=n_{i}+1}^{j} t(k)\right] = (18)$$
$$= t(n_{i})\delta(0) \cdot [\sigma_{r}(n_{i}) \cdot \delta(0) + Q(n_{i})].$$

Если $n_{i-1} \le m \le n_i - 2$ или $1 \le m \le n_1 - 2$, то для вычисления Q(m) используется выражение

$$Q(m) = \sum_{j=m+1}^{n_i-1} \sigma_r(j) \cdot \delta(j-m) \cdot \prod_{k=m+1}^{j} t(k) + \sigma_r(n_i) \cdot \delta(0) \cdot \delta(n_i - m - 1) \cdot \prod_{k=m+1}^{n_j} t(k) + \delta(n_i - m - 1) \cdot Q(n_i) \cdot \prod_{k=m+1}^{n_i} t(k).$$
(19)

Используя выражения (8)-(12), можно также получить левосторонние рекуррентные соотношения для $\rho(m)$ путем их подстановки в выражения (9), (10) работы [7]:

$$\rho(1) = \left\{ 1 + \sum_{m=1}^{N-1} [\sigma_r(m) / \sqrt{\sigma}] \cdot \gamma(m) \right\}^{-1},$$
(20)

$$\rho(m+1) = \rho(1) \cdot [\sigma_r(m)/\sqrt{\sigma}] \cdot \gamma(m) + \sigma_r(m) \cdot W(m) + \rho(m) \cdot P(m), \qquad (21)$$

где

$$W(1) = 0; \quad W(m) = \sum_{j=1}^{m-1} \rho(j) \cdot P(j) \cdot \sigma_l(j) \cdot \delta_l(j,m) \prod_{k=j+1}^m t(k), \quad 2 \le m \le (N-1),$$
(22)

$$\gamma(1) = \begin{cases} t(1) & \text{при } n_1 \neq 1 \\ t(1) \cdot \delta(0) & \text{при } n_1 = 1 \end{cases} \qquad \gamma(m) = \delta_l(m) \cdot \prod_{k=1}^m t(k) , \quad (2 \le m \le (N-1)) , \quad (23)$$

$$\gamma(N) = \delta_l(N) \cdot r(N) \cdot \prod_{k=1}^{N-1} t(k) .$$
(24)

Выразим W(m) в терминах простых петель ($\delta(n)$). Если $m < n_1$, тогда межцепочечные сшивки не влияют на W(m) и

$$W(1) = 0; \quad W(m) = \sum_{j=1}^{m-1} \rho(j) \cdot P(j) \cdot \delta(m-j) \prod_{k=j+1}^{m} t(k) , \quad 2 \le m \le (N-1) .$$
(25)

Если $m = n_i$, то

$$W(n_i) = t(n_i) \cdot \rho(n_i - 1) \cdot P(n_i - 1) \cdot \sigma_l(n_i - 1) \cdot \delta(0)^2 + t(n_i) \cdot \delta(0)W(n_i - 1) .$$
(26)

Если рассматриваемая пара оснований (*m*) находится между сшитыми звеньями ($n_i < m < n_{i+1}$) или между последней сшивкой и правым концом ($n_\omega < m \le N-1$), то

$$W(m) = \sum_{j=n_i}^{m} \rho(j) \cdot P(j) \cdot \sigma_l(j) \cdot \delta(m-j) \cdot \prod_{k=j+1}^{m} t(k) + \rho(n_i-1) \cdot P(n_i-1) \cdot \sigma_l(n_i-1) \times \delta(0) \cdot \delta(m-n_i) \cdot \prod_{k=n_i}^{m} t(k) + \delta(m-n_i) \cdot W(n_i-1) \cdot \prod_{k=n_i}^{m} t(k).$$

$$(27)$$

4. Результаты вычислений

В данной работе предложен метод расчета кривых плавления сшитых ДНК. В теории учитываются две основные особенности сшитой ДНК:

При достаточно высокой температуре выплавляются все звенья сшитой ДНК.
 Однако в отличие от обычной ДНК, цепи не разделяются в точках, где расположены сшивки.
 Это вызывает формирование дополнительных петель. Очевидно, что отсутствие локального и общего разделения цепей уменьшает энтропию расплавленного состояния и вызывает увеличение *T_m*.



Рис.1. Изменение температуры плавления ДНК [$\delta(T_m)$], вызванное образованием межцепочечных сшивок. C_{cr} – относительная концентрация межцепочечных сшивок на пару оснований. 1) Идеальные сшивки, сшивающие нити ДНК, но не изменяющие локальную стабильность двойной спирали; 2) Бесконечная локальная стабилизация в точках сшивания; 3) Бесконечная локальная дестабилизация в точках сшивания.

2) Сшивки, как и другие химические модификации, могут увеличивать и уменьшать свободную энергию перехода спираль-клубок сшитых пар оснований в точках их размещения, что увеличивает или уменьшает температуру плавления ДНК.

В работе проведено компьютерное моделирование обоих эффектов. На рис.1 представлена зависимость T_m от относительной концентрации сшивок на пару оснований

 (C_{cr}) . Кривая 1 соответствует идеальным сшивкам, которые не изменяют свободную энергию ДНК в точках их размещения. Идеальные сшивки вызывают монотонное увеличение T_m с ростом C_{cr} . Кривая 2 соответствует бесконечно сильной локальной стабилизации ДНК в точках сшивания, а кривая 3 – случаю бесконечно сильной локальной дестабилизации в этих же точках.



Рис.2. Изменение температуры плавления $[\delta(T_m)]$, при образовании межцепочечных сшивок, которые вызывают локальную дестабилизацию двойной спирали. C_{cr} – относительная концентрация межцепочечных сшивок на пару оснований. Цифрами показано уменьшение свободной энергии перехода спираль-клубок в точках сшивания.

Случай локальной дестабилизации в точках сшивания подробно представлен на рис.2. Из рисунка видно, что, если концентрация сшивок мала, то они вызывают увеличение T_m даже при сильной локальной дестабилизации двойной спирали в точках сшивания. При увеличении числа сшивок (дозы облучения) рост Т_т замедляется и даже может смениться дестабилизацией. Эти результаты могли бы дать очень простое качественное объяснение экспериментальных данных по α- и у-облучению растворов ДНК [4-6], если бы максимум изменения температуры плавления при низких концентрациях сшивок, вызывающих локальную дестабилизацию, был бы выше и достигал бы экспериментального значения ~3°С, после которого следовало бы резкое уменьшение стабильности [6]. Экспериментальные данные [6] свидетельствуют о более сложном влиянии облучения на стабильность ДНК. Достаточно большой подъем температуры при низких дозах показывает, что в точках сшивания не происходит сильной локальной дестабилизации двойной спирали. Снижение же температуры плавления после первоначального ее роста вызвано другими модификациями: однонитевыми и двунитевыми разрывами, и, возможно, монофункциональными аддуктами и внутрицепочечным сшиванием. Однако эти модификации возникают при более высоких дозах, по сравнению со сшивками. Их дестабилизирующее действие прямо пропорционально их числу.

Моделирование позволяет заключить, что при низких дозах возникают именно сшивки, число которых быстро достигает насыщения. Насыщение связано с тем, что предпочтительные места образования сшивок определяются сравнительно редкими последовательностями пар оснований ДНК. Для УФ-излучения такая селективность сшивания определенных последовательностей пар оснований была доказана [4]. Другие модификации, которые вызывают дестабилизацию, возникают при более высоких дозах. Но на ДНК имеется значительно большее число мест, где они могут возникнуть. Это и является причиной дестабилизации ДНК при высоких дозах, поскольку относительный эффект дестабилизации, вызванный разрывами цепи и внутри-цепочечными сшивками, становится большим, чем стабилизация, обусловленная сшиванием, которая не увеличивается при высоких дозах из-за ограниченного числа мест на ДНК, где могут возникать сшивки.

Автор выражает благодарность проф. Д.Ю.Ландо за помощь, оказанную при выполнении данной работы.

Работа частично поддержана фондом МНТЦ (грант А301.2).

ЛИТЕРАТУРА

- 1. J.Marmur, L.Grossman. Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 47, 778 (1961).
- 2. R.O.Rahn. In: Photophysiology (A.C.Giese, ed.), Academic Press, New York, p. 231, 1973.
- 3. Sh.L.Labiuk, L.T.J.Delbaere, J.S.Lee. Photochemistry and Photobiology, 73, 579 (2001).
- 4. D.F.Uyesugi, C.N.Trumbore. Int. J. Radiat. Biol. Relat. Stud. Phys. Chem. Med., 44, 627 (1983).
- A.G.Georgakilas, K.S.Haveles, V.Sophianopoulou, L.Sakelliou, G.Zarris, E.G.Sideris. Radiat. Res., 153, 258 (2000).
- 6. A.G.Georgakilas, L.Sakelliou, E.G.Sideris, L.H.Margaritis, V.Sophianopoulou. Radiat. Res., 150, 488 (1998).
- 7. D.Poland, Biopolymers, 13, 1859 (1974).
- 8. M.Fixman, J.J.Freire. Biopolymers, 16, 2693 (1977).
- 9. R.M.Wartell, A.S.Benight. Physics Reports, 126, 67 (1985).
- 10. K.J.Breslauer. Methods in Enzymology, 258, 221 (1995).

ԴՆԹ-Ի ԿԱՅՈՒՆՈՒԹՅԱՆ ՓՈՓՈԽՈՒԹՅԱՆ ՄՈԴԵԼԱՎՈՐՈՒՄԸ ՃԱՌԱԳԱՅԹՄԱՆ ՀԵՏԵՎԱՆՔՈՎ ՇՂԹԱՆԵՐՈՒՄ ԱՌԱՋԱՑԱԾ ԿՑԱԿԱՐՄԱՆ ԺԱՄԱՆԱԿ

Վ.Ի. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ

Առաջարկված է կցակարված ԴՆԹ-ների հալման կորերի համակարգչային մոդելավորման տեսական մեթոդ։ Մեթոդում հաշվի է առնված, որ բարձր ջերմաստիձաններում ԴՆԹ-ի կրկնակի պարույրի լրիվ հալման դեպքում նույնիսկ, կցակարման կետում ԴՆԹ-ի թելերը չեն կարող առանձնանալ։ Ստացված արդյունքների հիման վրա քննարկվում են ԴՆԹ-ի ՈՒՄ, α- և y- ձառագայթահարված յուծույթների համար ստացված փորձարարական տվյալները։

MODELING OF DNA STABILITY ALTERATION AT INTERSTRAND CROSSLINKING BY IRRADIATION

V.I. VARDANYAN

A theoretical method is developed for computer modeling of calculation of melting curves of crosslinked DNA. The method takes into account that, at the point of crosslinking, DNA double helix can be fully melted upon the heating but the DNA strands cannot be separated. Based on these results, experimental data on UV-, α - and γ -irradiations of DNA solutions are discussed.

УДК 573.3

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ СТАБИЛЬНОСТИ ДНК ПРИ МЕЖЦЕПОЧЕЧНОМ СШИВАНИИ ОБЛУЧЕНИЕМ

В.И. ВАРДАНЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 24 мая 2006 г.)

Разработан теоретический метод компьютерного моделирования кривых плавления сшитых ДНК. В методе учитывается, что в точке сшивания двойная спираль ДНК может быть полностью расплавлена при повышении температуры, но нити ДНК при этом не могут разделяться. На основании полученных результатов обсуждаются экспериментальные данные по УФ-, α - и *у*-облучению растворов ДНК.

1. Введение

УФ-, у- и α -облучение вызывают различные модификации в структуре ДНК: однонитевые и двунитевые разрывы, внутрицепочечные и межцепочечные сшивки, а также монофункциональные аддукты. Разрывы дестабилизируют структуру ДНК и снижают ее температуру плавления (T_m). Межцепочечные сшивки увеличивают T_m . Однако, известно, что при УФ-облучении формирование межцепочечных сшивок является редким событием, и их концентрация в сотни раз ниже, чем внутрицепочечных сшивок, образующихся между соседними основаниями тимина [1,2]. Некоторые ионы металлов усиливают формирование сшивок, вызванное *у*- и УФ-облучением [3]. Известно также, что низкие дозы *у*- и α облучения увеличивают стабильность ДНК (температуру плавления, T_m), а более высокие дозы уменьшают ее [4-6]. Для объяснения этих экспериментальных данных нами разработан теоретический метод расчета кривых плавления сшитых ДНК. В методе учитывается, что в точке сшивания двойная спираль ДНК может быть полностью расплавлена при повышении температуры, но нити ДНК при этом не разделяются.

2. Обозначения, используемые в работе

Обозначения, используемые в этой работе, являются модификацией обозначений Поланда [7] и Фиксмана-Фраери [8]. Данная модификация лучше описывает сшитую ДНК. Ниже приводится список основных обозначений и простых соотношений.

N-число пар оснований (звеньев) в ДНК; при расчетах в этой работе использовалось N=5000 пар оснований (п.о.).

 $r(m) = \exp[-(\Delta H_m - T \cdot \Delta \Delta S_m)/(RT)] = \exp[-\Delta s_m \cdot (r_m - T)/(RT)] -$ статистический вес расплав-

ленной пары с номером m, где m = 1÷ N. $\Delta\Delta H$ m, $\Delta\Delta$ Sm > 0 – изменения энтальпии и энтропии звен*а* m при переходе спираль-клубок; эти параметры изменяются после модификации пары номе*р* m. T – температура (K); R – газовая постоянная. Для немодифицированных AT- и GC-пар температуры плавления их гомополимеро*в* Tm, соответственно, равн*ы тAT* = 65,2°C *и r*GC = 107,8°C [9]. Δ Sm = 24,85 кал/(моль·K) – изменение энтропии на одну немодифицированную пару оснований при плавлении молекулы ДНК [9]

Статистический вес спиральной пары предполагается равным единице.

σ= 5·10⁻⁵ – значение фактора кооперативности плавления ДНК (т.е. статистический вес двух границ внутренней расплавленной области, образующей петлю).

 $\sigma(m,j) = \sigma_l(m) \cdot \sigma_r(j)$ – модифицированная форма фактора кооперативности плавления ДНК, где $\sigma_l(m)$ и $\sigma_r(j)$ являются статистическими весами левой и правой границы расплавленного участка, которые могут различаться из-за химической модификации. *m* является номером последнего спирального звена перед расплавленным участком и *j* является номером последнего звена этого участка. Если звенья *m* и *j* не содержат химической модификации, то $\sigma_l(m) = \sigma_r(j) = \sqrt{\sigma}$.

 $\delta(m) = (m+d)^{-\alpha}$ – петлевой фактор внутренней расплавленной области длиной *m*, не содержащей сшитых пар оснований; *d* – эмпирический параметр жесткости [8]. При расчетах использовались значения $\alpha = 1,7$ и d = 1 [8,9].

 β – фактор первичной ассоциации цепей (параметр инициирования спирали, которое сопровождается возникновением двух энергетически невыгодных границ между первым спиральным участком и правым и левым расплавленными концами).

 ω – число сшивок, расположенных на звеньях с номерами $n_1,n_2,...,n_\omega.$

 $\delta(0)$ – энтропийный фактор петли, образованной двумя сшивками, расположенными на соседних парах расплавленного участка, или сшивкой на расплавленной паре, смежной со спиральной. Расплавленный участок из одной сшитой пары включает две такие петли и его петлевой фактор равен $\delta(0)^2$.

P(m) – условная вероятность того, что звено (m+1) является спиральным, если звено m спирально $(m = 1 \div (N-1))$. $t(m) = P(m) \cdot r(m)$ – вспомогательный параметр, $\rho(m)$ – безусловная (априорная) вероятность того, что звено m является спиральным для состояний макромолекул ДНК, содержащих хотя бы одно спиральное звено $(m = 1 \div (N-1))$.

L – общее число молекул ДНК в растворе; L_2 – число молекул ДНК, содержащих хотя бы одно спиральное звено. N_2 – среднее число спиральных звеньев в молекулах ДНК, содержащих хотя бы одно спиральное звено, т.е. в частично расплавленных молекулах. C_t – общая молярная концентрация цепей ДНК.

 $v_{int} = N_2 / N$ – средняя степень спиральности молекул ДНК, содержащих хотя бы одно спиральное звено. Очевидно, что $v_{int} = N^{-1} \cdot \sum_{k=1}^{n} \rho(k)$.

 $v_{ext} = L_2 / L$ – доля молекул ДНК, содержащих хотя бы одно спиральное звено; (1- v_{ext}) является долей полностью расплавленных молекул. $v = L_2 N_2 / LN = v_{int} \cdot v_{ext}$ – общая степень спиральности.

 $P_{hel} = \rho(1) \cdot \prod_{k=1}^{m} P(k)$ – вероятность того, что молекула ДНК содержит только спиральные пары оснований.

3. Алгоритм вычислений

Для расчета кривой плавления, т.е. зависимости степени спиральности от температуры необходимо найти v_{ext} и v_{int} .

Для линейных немодифицированных и химически модифицированных ДНК без межцепочечных сшивок цепи полностью расходятся после плавления. Диссоциация описывается параметром ϑ_{ext} , т.е. долей молекул, содержащих спиральные пары. $(1 - \vartheta_{ext})$ является долей полностью расплавленных молекул. При использовании результатов работы [10] получим выражения (1),(2) для равновесной константы ассоциации нитей ДНК *K* и вспомогательного параметра *F*, соответственно, для несамокомплементарных цепей ДНК [реакция ассоциации $S_1 + S_2$ (S_{12} при условии $[S_1] = [S_2] = (1 - \upsilon_{ext}) \cdot C_t / 2]$ и самокомплементарных цепей [реакция ассоциации $2S_1 \leftrightarrows S_{11}$]:

$$K = \frac{[S_{12}]}{[S_1] \cdot [S_2]} = \frac{C_t \cdot \vartheta_{ext} / 2}{[C_t \cdot (1 - \vartheta_{ext}) / 2]^2} = \frac{2 \cdot \vartheta_{ext}}{(1 - \vartheta_{ext})^2 \cdot C_t}; \quad F = \frac{1 + K \cdot C_t}{K \cdot C_t},$$
(1)

$$K = \frac{[S_{11}]}{[S_1]^2} = \frac{C_t \cdot \vartheta_{ext} / 2}{[C_t \cdot (1 - \vartheta_{ext})]^2} = \frac{\vartheta_{ext}}{2 \cdot (1 - \vartheta_{ext})^2 \cdot C_t}; \quad F = \frac{1 + 4K \cdot C_t}{4 \cdot K \cdot C_t}.$$
 (2)

Из выражений (1) и (2) следует, что для обоих типов цепей ДНК

$$\vartheta_{ext} = F - \sqrt{F^2 - 1} \,. \tag{3}$$

Если в цепи ДНК имеются межцепочечные сшивки, то диссоциация цепей отсутствует, и реакция ассоциации имеет вид $S_{o1} \leftrightarrows S_{o2}$, независимо от типа цепей, где $[S_{o1}] = (1 - v_{ext}) \cdot C_t / 2], [S_{o2}] = v_{ext} \cdot C_t / 2$. Отсюда следует, что

$$K = \frac{[S_{o2}]}{[S_{o1}]} = \frac{C_t \cdot \vartheta_{ext}/2}{C_t \cdot (1 - \vartheta_{ext})/2} = \frac{\vartheta_{ext}}{(1 - \vartheta_{ext})} \quad \text{if} \quad \vartheta_{ext} = K/(1 + K) .$$

$$\tag{4}$$

Для дальнейших вычислений необходимо определить константу K, которая равна отношению суммы статистического веса нерасплавленного состояния и всех частично расплавленных состояний (Z_{int}) к статистическому весу полностью расплавленного состояния (q(N)):

$$K = Z_{int} / q_l(N) \,. \tag{5}$$

Выражение для статистического веса состояний, содержащих хотя бы одно спиральное звено (Z_{int}), можно найти через вероятность полностью спирального состояния молекулы ДНК по отношению ко всем не полностью расплавленным состояниям (P_{hel}). Эта вероятность равна отношению статистического веса полностью спирального состояния (который равен 1) и статистического веса всех не полностью расплавленных состояний (Z_{int}), т.е. $P_{hel} = 1/Z_{int}$. С другой стороны, согласно [7]

$$P_{hel} = \rho(1) \cdot \prod_{k=1}^{N-1} P(k) .$$
(6)

Отсюда следует, что

$$Z_{int} = \left[\rho(1) \cdot \prod_{k=1}^{N-1} P(k)\right]^{-1}$$

Следовательно, для всех рассмотренных типов ДНК (несамокомплементарных, самокомплементарных и сшитых)

$$K = \beta \cdot \left\{ \left[\rho(1) \cdot \prod_{m=1}^{N-1} P(m) \right] \cdot \delta_l(N) \prod_{k=1}^{N} r(k) \right\}^{-1}.$$
 (7)

Найдем P(m) и $\rho(m)$, необходимые для расчета v_{int} и v_{ext} . Как и в подходе Поланда [7] (разработанном для несшитой ДНК), в случае молекулы сшитой ДНК с заданной последовательностью природных и модифицированных нуклеотидов, для расчета v_{int} необходимо вычислить (*N*-1) условных вероятностей (P(m)) того, что звено m+1 спирально при условии спиральности звена с номером m, а также N безусловных вероятностей $\rho(m)$ того, что звено m находится в спиральном состоянии, и (*N*-1) вспомогательных параметров $t(m)=t(m) \cdot P(m)$. С этой целью рассмотрим плавление цепи ДНК из N звеньев, которые пронумерованы слева направо: m = 1, 2, ..., N. В цепи ДНК имеется ω межцепочечных сшивок, которые расположены на звеньях с номерами m, $m_2, ..., n$. Кроме того, имеются монофункциональные аддукты и внутрицепочечные сшивки, также образованные облучением, которые вызывают соответствующее изменение t(m).

Для внутреннего расплавленного участка (ограниченного спиральными парами с обоих концов), который включает *и* сшивок, энтропийный петлевой фактор может быть выражен как произведение энтропийных факторов простых петель $\delta(L_k) = (d + L_k)^{-\alpha}$, где $L_k -$ длина *k*-ой простой петли. Пусть $\delta_l(m, j)$ являются петлевыми факторами внутреннего расплавленного участка, который начинается после спирального звена с номером *m* и его последнее (расплавленное) звено имеет номер *j*, т.е. *j*-*m* является длиной рассматриваемого участка. $\delta_l(j)$ является петлевым фактором левого расплавленного конца, последнее (расплавленное) звено которого имеет номер *j*, т.е. длина участка равна *j*. $\delta_l(m)$ – петлевой фактор правого расплавленного конца ДНК, который начинается после спирального звена с номером *m* и продолжается до конца цепи. Длина этого участка равна *N*-*m*.

Внутренний расплавленный участок, не содержащий сшивок, формирует одну простую петлю, для которой $\delta_l(m, j) = \delta(n)$, где $\delta(n)$ – энтропийный фактор для петли длиной в n = j - m звеньев. Расплавленные концы при отсутствии сшивок не образуют петель и поэтому $\delta_l(j) = \delta_r(m) = 1$. Монофункциональные аддукты и внутрицепочечные сшивки слабо меняют величину петлевого фактора заданной длины. Однако, межцепочечные сшивки, формируя дополнительные петли, существенно изменяют петлевые факторы всех трех типов участков, и это необходимо учесть в теории. Для расплавленного участка, который включает n расплавленных пар (u из них содержат межцепочечные сшивки), энтропийный фактор можно выразить через энтропийные факторы простых петель:

$$\delta_I(m,j) = \prod_{k=1}^{u+1} \delta(L_k); \qquad n = j - m,$$

$$\delta_l(j) = \prod_{k=1}^u \delta(L_k); \quad n = j ,$$

$$\delta_r(m) = \prod_{k=1}^u \delta(L_k); \quad n = N - m .$$
(8)

Для сшитой ДНК выражения (24) работы [7] изменим следующим образом:

$$q_l(j) = [\sigma_r(j)/\sqrt{\sigma}] \cdot \delta_l(j) \cdot \prod_{k=1}^j r(k);$$
(9)

$$q_l(N) = \beta^{-1} \cdot \delta_l(N) \cdot \prod_{k=1}^N r(k) , \qquad (10)$$

$$q_r(m) = [\sigma_l(m)/\sqrt{\sigma}] \cdot \delta_r(m) \cdot \prod_{k=m+1}^N r(k);$$
(11)

$$q_I(m, j) = [\sigma_I(m) \cdot \sigma_r(j)] \cdot \delta_I(m, j) \cdot \prod_{k=m+1}^{J} r(k), \qquad (12)$$

где r(k), β , $\sigma_l(m)$ $u \sigma_r(j)$ описаны выше, (q_l) , (q_r) и (q_l) – статистические веса расплавленных левого конца, правого конца и внутренних последовательностей, а $\delta_l(j)$, $\delta_l(m, j)$, $\delta_r(m)$ заданы выражениями (8).

Подставляя $q_l(j)$ и $q_l(m, j)$ из наших выражений (5) в выражение (4) из работы [7], можно получить выражения (13)-(16) вместо выражений (26), (27) в работе Поланда [7] и вместо выражений Фиксмана–Фраери (2)-(4) в [8], полученных для ДНК без сшивок:

$$t(N-1) = \begin{cases} r(N-1) \cdot \{1 + [\sigma_l(N-1)/\sqrt{\sigma}] \cdot r(N)\}^{-1} & \text{при} \quad n_{\omega} \neq N, \\ r(N-1) \cdot \{1 + [\sigma_l(N-1)/\sqrt{\sigma}] \cdot r(N) \cdot \delta(0)\}^{-1} & \text{при} \quad n_{\omega} = N, \end{cases}$$
(13)

$$t(m) = r(m) \cdot \{1 + \sigma_l(m) \cdot [Q(m) + \beta(m)/\sqrt{\sigma}]\}^{-1}, \quad m = N - 2, \dots, 1,$$
(14)

где

$$Q(N-1) = 0; \quad Q(m) = \sum_{j=m+1}^{N-1} \sigma_r(j) \cdot \delta_I(m,j) \cdot \prod_{k=m+1}^j t(k), \quad (15)$$

$$\beta(N-1) = \begin{cases} r(N) & \text{При} \quad n_{\omega} \neq N \\ r(N) \cdot \delta(0) & \text{При} \quad n_{\omega} = N \end{cases} \quad \beta(m) = \delta_r(m) \cdot r(N) \cdot \prod_{k=m+1}^{N-1} t(k) \,. \tag{16}$$

Выразим Q(m) в терминах простых петель ($\delta(n)$). Если $m \ge n_{\omega}$, то межцепочечные сшивки не влияют на Q(m), которое остается таким же, как и в случае немодифицированной ДНК:

$$Q(m) = \sum_{j=m+1}^{N-1} \sigma_r(j) \cdot \delta(j-m) \cdot \prod_{k=m+1}^{j} t(k) .$$
(17)

Если $m = n_i - 1$, то Q(m) задается выражением:

$$Q(n_{i}-1) = t(n_{i}) \cdot \sigma_{r}(n_{i}) \cdot \delta(0)^{2} + t(n_{i}) \cdot \delta(0) \cdot \left[\sum_{j=n_{i}+1}^{N-1} \sigma_{r}(j) \cdot \delta_{I}(n_{i},j) \cdot \prod_{k=n_{i}+1}^{j} t(k)\right] = (18)$$
$$= t(n_{i})\delta(0) \cdot [\sigma_{r}(n_{i}) \cdot \delta(0) + Q(n_{i})].$$

Если $n_{i-1} \le m \le n_i - 2$ или $1 \le m \le n_1 - 2$, то для вычисления Q(m) используется выражение

$$Q(m) = \sum_{j=m+1}^{n_i-1} \sigma_r(j) \cdot \delta(j-m) \cdot \prod_{k=m+1}^{j} t(k) + \sigma_r(n_i) \cdot \delta(0) \cdot \delta(n_i - m - 1) \cdot \prod_{k=m+1}^{n_j} t(k) + \delta(n_i - m - 1) \cdot Q(n_i) \cdot \prod_{k=m+1}^{n_i} t(k).$$
(19)

Используя выражения (8)-(12), можно также получить левосторонние рекуррентные соотношения для $\rho(m)$ путем их подстановки в выражения (9), (10) работы [7]:

$$\rho(1) = \left\{ 1 + \sum_{m=1}^{N-1} [\sigma_r(m) / \sqrt{\sigma}] \cdot \gamma(m) \right\}^{-1},$$
(20)

$$\rho(m+1) = \rho(1) \cdot [\sigma_r(m)/\sqrt{\sigma}] \cdot \gamma(m) + \sigma_r(m) \cdot W(m) + \rho(m) \cdot P(m), \qquad (21)$$

где

$$W(1) = 0; \quad W(m) = \sum_{j=1}^{m-1} \rho(j) \cdot P(j) \cdot \sigma_l(j) \cdot \delta_l(j,m) \prod_{k=j+1}^m t(k), \quad 2 \le m \le (N-1),$$
(22)

$$\gamma(1) = \begin{cases} t(1) & \text{при } n_1 \neq 1 \\ t(1) \cdot \delta(0) & \text{при } n_1 = 1 \end{cases} \qquad \gamma(m) = \delta_l(m) \cdot \prod_{k=1}^m t(k) , \quad (2 \le m \le (N-1)) , \quad (23)$$

$$\gamma(N) = \delta_l(N) \cdot r(N) \cdot \prod_{k=1}^{N-1} t(k) .$$
(24)

Выразим W(m) в терминах простых петель ($\delta(n)$). Если $m < n_1$, тогда межцепочечные сшивки не влияют на W(m) и

$$W(1) = 0; \quad W(m) = \sum_{j=1}^{m-1} \rho(j) \cdot P(j) \cdot \delta(m-j) \prod_{k=j+1}^{m} t(k) , \quad 2 \le m \le (N-1) .$$
(25)

Если $m = n_i$, то

$$W(n_i) = t(n_i) \cdot \rho(n_i - 1) \cdot P(n_i - 1) \cdot \sigma_l(n_i - 1) \cdot \delta(0)^2 + t(n_i) \cdot \delta(0)W(n_i - 1) .$$
(26)

Если рассматриваемая пара оснований (*m*) находится между сшитыми звеньями ($n_i < m < n_{i+1}$) или между последней сшивкой и правым концом ($n_\omega < m \le N-1$), то

$$W(m) = \sum_{j=n_i}^{m} \rho(j) \cdot P(j) \cdot \sigma_l(j) \cdot \delta(m-j) \cdot \prod_{k=j+1}^{m} t(k) + \rho(n_i-1) \cdot P(n_i-1) \cdot \sigma_l(n_i-1) \times \delta(0) \cdot \delta(m-n_i) \cdot \prod_{k=n_i}^{m} t(k) + \delta(m-n_i) \cdot W(n_i-1) \cdot \prod_{k=n_i}^{m} t(k).$$

$$(27)$$

4. Результаты вычислений

В данной работе предложен метод расчета кривых плавления сшитых ДНК. В теории учитываются две основные особенности сшитой ДНК:

При достаточно высокой температуре выплавляются все звенья сшитой ДНК.
 Однако в отличие от обычной ДНК, цепи не разделяются в точках, где расположены сшивки.
 Это вызывает формирование дополнительных петель. Очевидно, что отсутствие локального и общего разделения цепей уменьшает энтропию расплавленного состояния и вызывает увеличение *T_m*.



Рис.1. Изменение температуры плавления ДНК [$\delta(T_m)$], вызванное образованием межцепочечных сшивок. C_{cr} – относительная концентрация межцепочечных сшивок на пару оснований. 1) Идеальные сшивки, сшивающие нити ДНК, но не изменяющие локальную стабильность двойной спирали; 2) Бесконечная локальная стабилизация в точках сшивания; 3) Бесконечная локальная дестабилизация в точках сшивания.

2) Сшивки, как и другие химические модификации, могут увеличивать и уменьшать свободную энергию перехода спираль-клубок сшитых пар оснований в точках их размещения, что увеличивает или уменьшает температуру плавления ДНК.

В работе проведено компьютерное моделирование обоих эффектов. На рис.1 представлена зависимость T_m от относительной концентрации сшивок на пару оснований

 (C_{cr}) . Кривая 1 соответствует идеальным сшивкам, которые не изменяют свободную энергию ДНК в точках их размещения. Идеальные сшивки вызывают монотонное увеличение T_m с ростом C_{cr} . Кривая 2 соответствует бесконечно сильной локальной стабилизации ДНК в точках сшивания, а кривая 3 – случаю бесконечно сильной локальной дестабилизации в этих же точках.



Рис.2. Изменение температуры плавления $[\delta(T_m)]$, при образовании межцепочечных сшивок, которые вызывают локальную дестабилизацию двойной спирали. C_{cr} – относительная концентрация межцепочечных сшивок на пару оснований. Цифрами показано уменьшение свободной энергии перехода спираль-клубок в точках сшивания.

Случай локальной дестабилизации в точках сшивания подробно представлен на рис.2. Из рисунка видно, что, если концентрация сшивок мала, то они вызывают увеличение T_m даже при сильной локальной дестабилизации двойной спирали в точках сшивания. При увеличении числа сшивок (дозы облучения) рост Т_т замедляется и даже может смениться дестабилизацией. Эти результаты могли бы дать очень простое качественное объяснение экспериментальных данных по α- и у-облучению растворов ДНК [4-6], если бы максимум изменения температуры плавления при низких концентрациях сшивок, вызывающих локальную дестабилизацию, был бы выше и достигал бы экспериментального значения ~3°С, после которого следовало бы резкое уменьшение стабильности [6]. Экспериментальные данные [6] свидетельствуют о более сложном влиянии облучения на стабильность ДНК. Достаточно большой подъем температуры при низких дозах показывает, что в точках сшивания не происходит сильной локальной дестабилизации двойной спирали. Снижение же температуры плавления после первоначального ее роста вызвано другими модификациями: однонитевыми и двунитевыми разрывами, и, возможно, монофункциональными аддуктами и внутрицепочечным сшиванием. Однако эти модификации возникают при более высоких дозах, по сравнению со сшивками. Их дестабилизирующее действие прямо пропорционально их числу.

Моделирование позволяет заключить, что при низких дозах возникают именно сшивки, число которых быстро достигает насыщения. Насыщение связано с тем, что предпочтительные места образования сшивок определяются сравнительно редкими последовательностями пар оснований ДНК. Для УФ-излучения такая селективность сшивания определенных последовательностей пар оснований была доказана [4]. Другие модификации, которые вызывают дестабилизацию, возникают при более высоких дозах. Но на ДНК имеется значительно большее число мест, где они могут возникнуть. Это и является причиной дестабилизации ДНК при высоких дозах, поскольку относительный эффект дестабилизации, вызванный разрывами цепи и внутри-цепочечными сшивками, становится большим, чем стабилизация, обусловленная сшиванием, которая не увеличивается при высоких дозах из-за ограниченного числа мест на ДНК, где могут возникать сшивки.

Автор выражает благодарность проф. Д.Ю.Ландо за помощь, оказанную при выполнении данной работы.

Работа частично поддержана фондом МНТЦ (грант А301.2).

ЛИТЕРАТУРА

- 1. J.Marmur, L.Grossman. Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 47, 778 (1961).
- 2. R.O.Rahn. In: Photophysiology (A.C.Giese, ed.), Academic Press, New York, p. 231, 1973.
- 3. Sh.L.Labiuk, L.T.J.Delbaere, J.S.Lee. Photochemistry and Photobiology, 73, 579 (2001).
- 4. D.F.Uyesugi, C.N.Trumbore. Int. J. Radiat. Biol. Relat. Stud. Phys. Chem. Med., 44, 627 (1983).
- A.G.Georgakilas, K.S.Haveles, V.Sophianopoulou, L.Sakelliou, G.Zarris, E.G.Sideris. Radiat. Res., 153, 258 (2000).
- 6. A.G.Georgakilas, L.Sakelliou, E.G.Sideris, L.H.Margaritis, V.Sophianopoulou. Radiat. Res., 150, 488 (1998).
- 7. D.Poland, Biopolymers, 13, 1859 (1974).
- 8. M.Fixman, J.J.Freire. Biopolymers, 16, 2693 (1977).
- 9. R.M.Wartell, A.S.Benight. Physics Reports, 126, 67 (1985).
- 10. K.J.Breslauer. Methods in Enzymology, 258, 221 (1995).

ԴՆԹ-Ի ԿԱՅՈՒՆՈՒԹՅԱՆ ՓՈՓՈԽՈՒԹՅԱՆ ՄՈԴԵԼԱՎՈՐՈՒՄԸ ՃԱՌԱԳԱՅԹՄԱՆ ՀԵՏԵՎԱՆՔՈՎ ՇՂԹԱՆԵՐՈՒՄ ԱՌԱՋԱՑԱԾ ԿՑԱԿԱՐՄԱՆ ԺԱՄԱՆԱԿ

Վ.Ի. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ

Առաջարկված է կցակարված ԴՆԹ-ների հալման կորերի համակարգչային մոդելավորման տեսական մեթոդ։ Մեթոդում հաշվի է առնված, որ բարձր ջերմաստիձաններում ԴՆԹ-ի կրկնակի պարույրի լրիվ հալման դեպքում նույնիսկ, կցակարման կետում ԴՆԹ-ի թելերը չեն կարող առանձնանալ։ Ստացված արդյունքների հիման վրա քննարկվում են ԴՆԹ-ի ՈՒՄ, α- և y- ձառագայթահարված յուծույթների համար ստացված փորձարարական տվյալները։

MODELING OF DNA STABILITY ALTERATION AT INTERSTRAND CROSSLINKING BY IRRADIATION

V.I. VARDANYAN

A theoretical method is developed for computer modeling of calculation of melting curves of crosslinked DNA. The method takes into account that, at the point of crosslinking, DNA double helix can be fully melted upon the heating but the DNA strands cannot be separated. Based on these results, experimental data on UV-, α - and γ -irradiations of DNA solutions are discussed.

УДК 577.3

ВЛИЯНИЕ ВНЕШНЕГО ШУМА НА АДСОРБЦИЮ ЛИГАНДОВ НА ДНК

А.В. АРАКЕЛЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 18 июля 2006 г.)

Исследованы флуктуации числа адсорбированных на ДНК лигандов в случае, когда под воздействием внешнего шума флуктуирует количество лигандов в растворе. Вычислено среднее число адсорбированных на ДНК лигандов и показано, что при некотором соотношении между параметрами адсорбции и интенсивностью внешнего шума не происходит адсорбции лигандов на ДНК.

Практически все работы, в которых исследуются флуктуации числа связанных с ДНК лигандов, связаны с учетом внутренних флуктуаций [1-3] и лишь несколько работ посвящено исследованию внешнего шума на флуктуации числа связанных с ДНК лигандов [4]. Характер действия внешнего шума решающим образом зависит от того, к какому типу относится внешний шум – ланжевеновскому или мультипликативному. В работе [4] было исследовано влияние ланжевеновского шума на адсорбцию лигандов на ДНК.

В данной работе будет рассмотрен случай, когда под воздействием флуктуаций внешней среды флуктуирует количество лигандов в растворе и это приводит к тому, что шум оказывается мультипликативным. Как и в [3,4], адсорбцию и десорбцию лигандов на ДНК представим как квазихимическую реакцию связывания и распада лиганда с адсорбционным центром. ДНК представим в виде одномерного кристалла с N местами связывания, а лиганд, имеющий намного меньшие линейные размеры, при адсорбции занимает n мест на ДНК. Число свободных лигандов в растворе $c_f(t)$ можно представить в виде суммы среднего $\overline{c_f}$ и гауссовского белого шума $\xi(t)$ [5], среднее значение которого равно нулю, т.е. $\overline{\xi(t)} = 0$, $\overline{\xi(0)} \cdot \overline{\xi(t)} = \delta(t)$, где $\delta(t)$ – дельта-функция:

$$c_f(t) = \overline{c}_f + \sigma_n \cdot \xi(t) , \qquad (1)$$

 σ_n – интенсивность шума. Принимая, что число адсорбированных лигандов равно *x*, для случая малого заполнения легко показать, что уравнение, описывающее изменение во времени числа адсорбированных на ДНК лигандов, имеет вид

$$\frac{dx}{dt} = f_{c}(x) + \sigma_{n} \cdot g(x) \cdot \xi(t),
f_{c}(x) = k_{1}\overline{c_{f}}(N - (2n - 1)x) - k_{-1}x,
g(x) = k_{1}(N - (2n - 1)x),$$
(2)

где k₁ и k₋₁ – константы скоростей образования и распада комплекса лиганда с ДНК. Чтобы не вводить новые обозначения в (2) и далее, знак черты усреднения над параметрами опущен, он оставлен лишь у параметра, флуктуирующего под Поскольку воздействием внешнего флуктуирующий шума. параметр аппроксимирован гауссовским белым шумом, то согласно [5] в этом случае стохастическое дифференциальное уравнение (2) интерпретируется в смысле Стратановича. Процедура получения из (2) уравнения среднего числа адсорбированных на ДНК лигандов подробно описана в работе [6]. Получив уравнение для среднего числа адсорбированных на ДНК лигандов и решив его, можно получить следующее окончательное выражение для стационарного значения числа адсорбированных на ДНК лигандов \overline{x}_{st} в виде

$$\overline{x_{st}} = \frac{k_1 \overline{c_f} N - \frac{\sigma_n^2}{2} k_1^2 (2n-1)N}{k_{-1} + (2n-1)k_1 \overline{c_f} - \frac{\sigma_n^2}{2} k_1^2 (2n-1)^2}.$$
(3)

Из (3) видно, что при заданном уровне интенсивности внешнего шума адсорбция на ДНК отсутствует, когда число лигандов в растворе меньше некоторого определенного значения, которое определяется из условия равенства нулю числителя в выражении (3). Это значение равно

$$\overline{c_f^*} = \frac{\sigma_n^2 k_1 (2n-1)}{2} \ . \tag{4}$$

Из (4) следует, что с увеличением как интенсивности внешнего шума, так и k_1 эта область расширяется. При наличии внешнего шума число адсорбированых на ДНК лигандов меньше, чем при отсутствии шума. Эти результаты качественно отличаются как от влияния на адсорбцию ланжевеновского шума, так и от адсорбции в среде без шума [3,4].

ЛИТЕРАТУРА

- 1. Ю.Бабаян, В.Аракелян, Г.Потикян, Р.Казарян. Биофизика, 46, 1003 (2001).
- 2. Ю.Д.Нечипуренко, Г.В.Гурский. Биофизика, **48**, 773 (2003).
- 3. V.Arakelyan, Yu.Babayan, G.Potikyan. J. Biomol. Struct. Dyn., 18, 231 (2000).
- V.B.Arakelyan, S.G.Haroutiunian, H.V.Arakelyan, T.S.Haroutiunian. J. Biomol. Struct. Dyn., 20, 135 (2002).
- 5. W.Horsthemke, R.Lefever. Noise-Induced Transitions. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, N. Y., Tokyo, 1984.
- 6. С.А.Ахманов, Ю.Е.Дьяков, А.С.Чиркин. Введение в статистическую радиофизику и оптику. М., Наука, 1981.

ԲՈՎԱՆԴԱԿՈՒԹՅՈՒՆ

Դ.Մ.Սեդրակյան . Երկրորդ կարգի գերհաղորդիչներում քվանտային մրրիկների դինամիկ
հավասարումները․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․
Բ.Ռ.Ավչյան . Ատոմնային կոհերենտ սուպերպոզիցիոն վիձակները լազերային և համասեռ դաշտերում բազմաֆոտոն գրգոման միջոցով
Կ.Գ.Սարգսյան, Լ.Ն.Անանիկյան . Վիձակագրական գումարի զրոների բաշխման խտությունը Փոթսի միաչափ մոդելում
Հ.Ս.Երիցյան, Ա.Ա.Պապոյան, Հ.Մ.Առաքելյան, <u>Կ.Վ.Պապոյան</u> , Հ.Վ.Պիկիչյան. Էլեկտրամագ-
նիսական ալիքի թեք անցումը համասեռ և անհամասեռ պարուրային կառուցվածքով միջավայրերի շերտով․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․
Ա.Հ.Գևորգյան, Ա.Մ.Սեդրակյան . Բևեռացման հարթության պտույտի ուժեղացումը անիզոտրոպ
ուժեղացնող թիթեղում․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․
Լ.Գ.Գասպարյան, Վ.Պ.Մկրտչյան, Մ.Կ.Բալյան, Ա.Հ.Գրիգորյան . Ջերմաստիձանային արհեստական անիզոտրոպիան բյուրեղներում ռենտգենյան հաձախությունների տիրույթում
Լ.Մ.Պետրոսյան . Ֆոտոէլեկտրոնային թնդանոթի պարամետրերի դիագնոստիկայի և վերահսկման համակարգը
Մ.Օ.Միմոնյան . Էլեկտրոն-պիոն բաժանումը ATLAS նախագծի հադրոնային կալորիմետրում
Շ.Գ.Գասպարյան, Ա.Ա.Կիրակոսյան . Մահմանափակող պոտենցիալի ձևի ազդեցությունը լիցքակիրների իմպուլսի ռելաքսացիայի արագության վրա քվանտային լարում.․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․
Վ.Ի.Վարդանյան . ԴՆԹ-ի Կայունության փոփոխության մոդելավորումը Ճառագայթման հետևանքով շղթաներոմ առաջացած կցակարման ժամանակ․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․․
Հ.Վ.Առաքելյան . Արտաքին աղմուկի ազդեցությունը լիգանդների ադսորբցիայի վրա ԴՆԹ-ի վրա.

CONTENTS

D.M.Sedrakian . Equations of quantum vortex dynamics in II type superconductors	319
B.R.Avchyan. Coherent superposition states via multiphoton excitation of atoms in the l	aser and
uniform electric fields	324
K.G.Sargsyan, L.N.Ananikian. Distribution density of partition function zeros for	a one-
dimensional Potts model	333
H.S.Eritsyan, A.A.Papoyan, H.M.Arakelyan, K.V.Papoyan, H.V.Pikichyan.	Oblique
transmission of electromagnetic wave through homogeneous and inhomogeneous	helical
layers	340
A.H.Gevorgyan, A.M.Sedrakyan. Amplification of the polarization plane rotation	ı by an
anisotropic amplifying plate	345
L.G.Gasparyan, V.P.Mkrtchyan, M.K.Balyan, A.H.Grigoryan. Artificial tem	perature
anisotropy of crystals in the range of X-ray frequencies	353
L.M.Petrosyan. Diagnostic and control system of photogun parameters.	362
M.O.Simonyan. Electron-pion separation in the hadron calorimeter of ATLAS project.	368
Sh.G.Gasparyan, A.A.Kirakosyan. Influence of confining potential shape on the mo	memtum
relaxation rate of charge carriers in a quantum wire	374
V.I.Vardanyan. Modeling of DNA stability alteration at interstrand crosslinking by irradi	ation
	379
H.V.Arakelyan. Influence of external noise on the adsorption of ligands on DNA	389

СОДЕРЖАНИЕ

Д.М.Седракян . Динамические уравнения квантовых вихрей в сверхпроводниках рода	второго 319
Б.Р.Авчян . Когерентные суперпозиционные состояния атомов при многофо возбуждении в лазерном и однородном электрических полях	отонном
	324
К.Г.Саргсян, Л.Н.Ананикян . Плотность распределения нулей статистической сум одномерной модели Поттса.	имы для 333
О.С.Ерицян, А.А.Папоян, О.М.Аракелян, К.В.Папоян, О.В.Пикичян. На	клонное
прохождение электромагнитной волны через слои с однородной и неодно спиральной структурой	ородной 340
А.А.Геворгян, А.М.Седракян . Об усилении поворота плоскости поля усиливающей анизотропной пластинкой	ризации 345
Ш.Г.Гаспарян, А.А.Киракосян. Влияние формы ограничивающего потенциала релаксации импульса носителей заряда в квантовой проволоке	на темп 353
Л.М.Петросян . Система диагностики и контроля параметров фотоэлектронной пу	/шки
М.О.Симонян . Электрон-пионное разделение в адронном калориметре проекта А	JOZ TLAS
	368
Л.Г.Гаспарян, В.П.Мкртчян, М.К.Балян, А.Г.Григорян . Температурная искусс анизотропия кристаллов в области рентгеновских частот	твенная
	374
В.И.Варданян . Моделирование изменения стабильности ДНК при межцепо сшивании облучением	очечном 379
А.В.Аракелян. Влияние внешнего шума на адсорбцию лигандов на ДНК.	389

Тираж 150. Сдано в набор 27.08.2006. Подписано к печати 04.09.2006. Печ. л. 4,75. Бумага офсетная. Цена договорная. Типография НАН РА. 375019, Ереван, пр. Маршала Баграмяна, 24.