ISSN 0002-3035

# ФИЗИКА-ShQhuu-PHYSIC



ИЗВЕСТИЯ НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК АРМЕНИИ

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱՂԵՄԻԱՅԻ

> PROCEEDINGS OF NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF ARMENIA

42, N1, 2007

ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ՀԱՆՐԱՊԵՏՈՒԹՅԱՆ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱ НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК РЕСПУБЛИКИ АРМЕНИЯ

### зълъчиърр Известия **БРДРЧЦ ФИЗИКА**

∠usnr tom 42

Nº 1

EPEBAH

2007

ԵՐԵՎԱՆ

© Национальная Академия наук Армении Известия НАН Армении, Физика

.

.

The second second

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 535.14

# ЭРГОДИЧНОСТЬ В КОМПЬЮТЕРНОМ МОДЕЛИРОВАНИИ КВАНТОВЫХ ДИССИПАТИВНЫХ ПРОЦЕССОВ

#### А.О. АДАМЯН<sup>1</sup>, Т.В. ГЕВОРГЯН<sup>2</sup>, Г.Ю. КРЮЧКЯН<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт физических исследований НАН Армении

<sup>2</sup>Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 29 апреля 2006 г.)

Принцип эргодичности квантовой теории использован для разработки нового метода квантовых траекторий, который используется для численного моделирования квантовых диссипативных систем. С этой целью матрица плотности квантовой системы представлена в виде суммирования по ансамблю квантовых состояний временных интервалов. Метод использован для численных расчетов квантового ангармонического осциллятора.

#### 1. Введение

Квантовые открытые системы, как правило, описываются с помощью матрицы плотности, но не в рамках уравнения Шредингера для вектора состояния. Основным уравнением в таком подходе является уравнение для редуцированной матрицы плотности  $\rho(t)$ , т.е. матрицы плотности открытой системы, которая усреднена по переменным резервуара. В марковском приближении такое уравнение имеет следующий вид:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{h} [H,\rho] + \sum_{i} \left( L_{i}\rho L_{i}^{+} - \frac{1}{2}L_{i}^{+}L_{i}\rho - \frac{1}{2}\rho L_{i}^{+}L_{i} \right), \qquad (1)$$

где H является гамильтонианом системы и  $L_i$  представляют операторы Линд- блада, которые описывают взаимодействие системы с резервуаром [1]. В большинстве случаев не удается найти аналитические решения уравнения (1), и поэтому используются численные методы. Обычно при численных вычислениях матрица плотности записывается через базисные квантовые состояния в гильбертовом пространстве. Такой метод является удобным, когда число базисных состояний m достаточно мало, и не является практичным для больших m, т.к. число элементов матрицы плотности растет как  $m^2$ . Тем не менее, при решении большинства квантово-механических проблем мы вынуждены оперировать с большим числом базисных состояний. В таких случаях очень эффективным оказывается представление матрицы плотности в форме статистического среднего по ансамблю квантовых траекторий. Такой подход оказывается намного более экономичным в компьютерных вычислений. В последние

годы развиты два численных метода вычисления матрицы плотности через среднее по ансамблю квантовых траекторий: метод квантовых скачков, или метод Монте-Карло для вектора состояния, и метод диффузии квантового состояния (ДКС) [2,3]. Если взаимодействие квантовой системы с окружением является достаточно сильным, чтобы привести к эффекту локализации динамических переменных системы, то предпочтительным является другой метод – диффузии квантовых состояний с движущимся базисом [4]. В настоящей работе предложена модификация метода ДКС, которая позволяет существенно сэкономить вычислительные ресурсы в приложениях к исследованию диссипативных квантовых систем.

#### 2. Использование принципа эргодичности в методе ДКС

Основная идея, использованная в предложенном подходе состоит в комбинировании принципа эргодичности в квантовой теории с ДКС-методом квантовых траекторий. Как известно, в методе ДКС используется ансамбль стохастических векторов состояний систем  $|\Psi_{\mathcal{E}}(t)\rangle$ , а матрица плотности представляется в следующем виде:

$$\rho(t) = M\left(\left|\Psi_{\xi}(t)\right\rangle\left\langle\Psi_{\xi}(t)\right|\right) = \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \sum_{\xi}^{N} \left|\Psi_{\xi}(t)\right\rangle\left\langle\Psi_{\xi}(t)\right|.$$
(2)

Здесь *М* означает усреднение по ансамблю, а состояния ансамбля удовлетворяют следующему уравнению для квантовых траекторий:

$$\begin{aligned} \left| d\Psi_{\xi} \right\rangle &= \frac{i}{\hbar} H \left| \Psi_{\xi} \right\rangle dt - \frac{1}{2} \sum_{j} \left( L_{j}^{+} L_{j} + \left\langle L_{j}^{+} \right\rangle \left\langle L_{j} \right\rangle - 2 \left\langle L_{j}^{+} \right\rangle L_{j} \right) \Psi_{\xi} \right\rangle dt + \\ &+ \sum_{j} \left( L_{j} - \left\langle L_{j} \right\rangle \right) \Psi_{\xi} \right\rangle d\xi_{j} , \end{aligned}$$
(3)

где  $\langle L_j \rangle = \langle \Psi_{\xi}(t) | L_j | \Psi_{\xi}(t) \rangle$  и  $d\xi_j$  являются независимыми комплексными случайными переменными, удовлетворяющими условиям

$$M\left(d\xi_{j}\right) = M\left(d\xi_{j}d\xi_{k}\right) = 0, \qquad M\left(d\xi_{j}d\xi_{k}^{*}\right) = \delta_{jk}dt.$$

$$\tag{4}$$

При таком подходе среднее значение произвольного оператора представляется как квантовомеханическое среднее <...> по состоянию  $|\Psi_{\xi}(t)\rangle$  и усреднению по ансамблю траекторий:

$$\overline{F}(t) = M \left\langle \Psi_{\xi}(t) \middle| \hat{F} \middle| \Psi_{\xi}(t) \right\rangle.$$
(5)

Такой подход является очень эффективным при численном моделировании квантовых открытых систем. Некоторые примеры в области квантовой оптики приведены в работах [5-7]. В настоящей работе показывается, что произвольное среднее значение можно представить как среднее по одной из траекторий, однако вычисленной для различных временных интервалов. Действительно, рассмотрим стохастическое состояние  $|\Psi_{\xi}(t)\rangle$  для случайной последовательности временных интервалов, которые для определенности представим в виде возрастающей последовательности  $t_1 < t_2 < .... < t_n$ . Используя последовательность квантовых состояний  $|\Psi_{\xi}(t+t_n)\rangle$ , запишем матрицу плотности в следующем виде:

$$\rho(t) = \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \sum_{n}^{N} \left| \Psi_{\xi}(t+t_{n}) \right\rangle \left\langle \Psi_{\xi}(t+t_{n}) \right|.$$
(6)

Нетрудно непосредственно проверить, что если квантовые состояния  $|\Psi_{\xi}(t)\rangle$ удовлетворяют уравнению (3), то матрица плотности в форме (5) удовлетворяет уравнению (1). Отличие между результатами (2) и (6) состоит в том, что выражение (6) содержит суммирование по случайным временным интервалам одной из квантовых траекторий стохастического процесса  $\xi$  вместо суммирования по ансамблю траекторий, как в формуле (2). Такое заключение является следствием эргодичности квантовой теории, сформулированной для ДКС метода. Иллюстрация метода приводится на рис.1 и 2. Ниже также приводятся применения этого метода к двум диссипативным квантовым системам, которые описываются не зависящим от времени гамильтонианом, а также гамильтонианом, периодическим по времени.

#### 3. Квантовые вычисления для диссипативного нелинейного осциллятора

Хотя приведенные ниже результаты имеют общий характер, для конкретности будет рассмотрен квантовый ангармонический осцилятор под действием вынуждающей силы [5-7]. Квантовая динамика системы описывается уравнением (1) для редуцированной матрицы плотности в представлении взаимодействия, где гамильтониан имеет следующий вид:

$$H = \hbar \Delta a^{+} a + \hbar (f(t)a^{+} + f^{*}(t)a) + \hbar \chi (a^{+}a)^{2}.$$
(7)

Здесь  $a^+$ ,  $a^-$  операторы рождения и уничтожения,  $\Delta = \omega_0 - \omega$  есть расстройка резонанса от собственной частоты осциллятора  $\omega_0$  и  $\chi$  является параметром ангармоничности. В качестве возмущения рассмотрен сигнал на несущей частоте  $\omega$  и с модулированной амплитудой в следующей форме:

$$f(t) = \Omega_1 + \Omega_2 \exp(-i\delta t), \qquad (8)$$

где  $\delta$  есть модуляционная частота,  $\delta \ll \omega$ . Данная система взаимодействует с резервуаром, что приводит к диссипации осцилляторных состояний. Эти эффекты описываются последними членами в уравнении (1), где операторы Линдблада в этом случае равны:  $L_1 = \sqrt{(N_R + 1)\gamma a}$ ,  $L_2 = \sqrt{N_R \gamma a^+}$ , причем,  $\gamma$  является параметром затухания и  $N_R$  обозначает среднее число квантов резервуара. Отметим, что эта модель соответствует модифицированной модели осциллятора Дюфинга и для случая  $\Omega_2 = 0$  преобразуется в обычную модель ангармонического осциллятора под действием монохроматического возмущения.

#### 3.1. Случай стационарного гамильтониана

Эта ситуация может быть реализована, в частности, в приведенной модели осциллятора при отсутствии модуляции,  $\Omega_2 = 0$ . В этом случае гамильтониан (7) не зависит от времени и выражение (6) может быть представлено в более простой, интегральной форме. Для этого в выражении (6) выбираем временные интервалы как  $t_n = t_0 + n\Delta t$  и переходим к пределу  $\Delta t \rightarrow 0$ ,  $n \rightarrow \infty$  при условии, что  $T = N\Delta t$  является конечным. Таким образом, пе-

реходя в выражении (6) от усреднения по дискретным временным интервалам к интегрированию по произвольному интервалу *T*, получаем:

$$\rho(t) = \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} \left| \Psi_{\xi}(t+\tau) \right\rangle \left\langle \Psi_{\xi}(t+\tau) \right| d\tau.$$
(9)

Иллюстрация этого метода на примере вычисления среднего значения чисел заполнения осциллятора  $n = \langle a^+ a \rangle$  приведена на рис.1. Здесь сравниваются результаты вычисления отдельной траектории с результатом усреднения ансамбля траекторий по формуле (2).



Числа заполнений ангармонического осциллятора под действием монохроматического возмущения в зависимости от параметора  $\gamma t$ : а) временная эволюция одной из траекторий для характерных значений параметров, б) среднее значение чисел заполнения в результате суммирования по ансамблю траекторий для этих же параметров. Приведена иллюстрация процедуры выбора случайных временных интервалов.

Другая наша цель состояла в сравнении вычислений среднего значения чисел заполнения осциллятора по формулам (2) и (9). Вычисления показали, что выражение для матрицы плотности (9) приводит к результатам, совпадающим с приведенными на рис.1б только лишь в области временных интервалов  $t >> \gamma^{-1}$ , при  $t_0, T >> \gamma^{-1}$ . Таким образом, можно заключить, что область применения выражения (9) ограничивается временными интервалами, превосходящими переходной режим.

#### 3.2. Случай периодического по времени гамильтониана

Другое интересное представление формулы (6) можно получить для квантовых систем с периодическим по времени гамильтонианом. В этом случае H(t+T) = H(t), поэтому представляется возможным выбрать последовательность временных интервалов следующим образом:  $t_n = nT$  (n = 1, 2, ...). Легко проверить, что эта процедура приводит к следуюшему

результату для матрицы плотности:

$$\rho(t) = \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \sum_{n}^{N} \left| \Psi_{\xi}(t + nT) \right\rangle \left\langle \Psi_{\xi}(t + nT) \right|.$$
(10)

Легко видеть, что именно такой случай реализуется для модели ангармонического осциллятора с амплитудной модуляцией,  $\Omega_2 \neq 0$ , в которой период гамильтониана равен  $T = 2\pi/\delta$ . Приведем результаты численных расчетов чисел заполнения осциллятора для одной траектории (рис.2а) и среднего значения  $n = \langle a^+ a \rangle$  для ансамбля траекторий, вычисленного по формуле (6) рис.26. Анализ показывает, что представление матрицы плотности в форме усреднения по различным участкам траектории (9) действительно приводит к результатам рис.26 для временного интервала  $t \geq 4\gamma^{-1}$ , превосходящего переходной режим.



Рис.2. Численные расчеты для чисел заполнения ангармонического осцилятора под действием возмущения с амплитудной модуляцией для характерных значений параметров: а) временная эволюция одной из траекторий, где указана процедура выбора временных интервалов; б) среднее значение чисел заполнения в результате усреднения по траекториям. Ниже приводится временная зависимость возмущения в произвольных единицах.

Таким образом, можно заключить, что формулировка метода ДКС в рамках усреднения по различным временным интервалам одной из произвольных траекторий аналогична обычному методу ДКС, который основан на стохастическом усреднении, однако, для временных интервалов, соответствующих отрелаксированному режиму. Вместе с этим, очевидно, что приведенный подход, основанный на принципе эргодичности, намного более эффективен для вычислений в области оольших временных интервало. 103воляет существенно сэкономить компьютерное время.

Данная работа поддержана грантом INTAS 04-77-7289.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. C.W.Gardiner. Quantum Noise. Springer, Berlin, 1992.

- 2. N.Gisin, I.C.Percival. J. Phys., A 25, 5677 (1992).
- 3. H.J.Carmichael. An Open Systems Approach to Quantum Optics. Springer, Berlin, 1993.
- 4. R.Schack, T.A.Brun, L.C.Percival. J. Phys., A 28, 5401 (1995).

5. H.H.Adamyan, S.B.Manvelyan, G.Yu.Kryuchkyan. Phys. Rev., A63, 022102 (2001).

6. H.H.Adamyan, S.B.Manvelyan, G.Yu.Kryuchkyan. Phys. Rev., E64, 046219 (2001).

7. G.Yu.Kryuchkyan, S.B.Manvelyan. Phys. Rev. Lett., 88, 094101 (2002).

#### ԷՐԳՈԴԻԿՈՒԹՅՈՒՆԸ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԴԻՍԻՊԱՏԻՎ ՊՐՈՑԵՍՆԵՐԻ ՀԱՄԱԿԱՐԳՉԱՅԻՆ ՄՈԴԵԼԱՎՈՐՈՒՄՈՒՄ

#### Հ.Հ. ԱԴԱՄՅԱՆ, Տ.Վ. ԳԵՎՈՐԳՅԱՆ, Գ.Յու. ԿՐՅՈՒՉԿՅԱՆ

Քվանտային տեսության էրգոդիկության սկզբունքը օգտագործված է քվանտային դիսիպատիվ համակարգերի թվային մոդելավորման, քվանտային հետագծերի նոր մեթոդի մշակման համար։ Այդ նպատակով քվանտային համակարգի խտության մատրիցը ներկայացված է ժամանակային ինտերվալների ըստ անսամբլի քվանտային վիճակների գումարման տեսքով։ Մեթոդը կիրառված է քվանտային անհարմոնիկ տատանակի թվային հաշվարկների համար։

#### ERGODICITY IN COMPUTER MODELING OF QUANTUM DISSIPATIVE PROCESSES

#### H.H. ADAMYAN, T.V. GEVORGYAN, G.Yu. KRYUCHKYAN

The ergodicity of quantum theory is used for modification of quantum trajectories approach proposed for numerical simulation of quantum dissipative systems. For this goal the reduced density operator of a quantum system is represented via an ensemble of quantum states for random time intervals. This approach is illustrated for numerical simulations of a time-modulated anharmonic oscillator.

УДК 535.14

# ЭРГОДИЧНОСТЬ В КОМПЬЮТЕРНОМ МОДЕЛИРОВАНИИ КВАНТОВЫХ ДИССИПАТИВНЫХ ПРОЦЕССОВ

#### А.О. АДАМЯН<sup>1</sup>, Т.В. ГЕВОРГЯН<sup>2</sup>, Г.Ю. КРЮЧКЯН<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт физических исследований НАН Армении

<sup>2</sup>Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 29 апреля 2006 г.)

Принцип эргодичности квантовой теории использован для разработки нового метода квантовых траекторий, который используется для численного моделирования квантовых диссипативных систем. С этой целью матрица плотности квантовой системы представлена в виде суммирования по ансамблю квантовых состояний временных интервалов. Метод использован для численных расчетов квантового ангармонического осциллятора.

#### 1. Введение

Квантовые открытые системы, как правило, описываются с помощью матрицы плотности, но не в рамках уравнения Шредингера для вектора состояния. Основным уравнением в таком подходе является уравнение для редуцированной матрицы плотности  $\rho(t)$ , т.е. матрицы плотности открытой системы, которая усреднена по переменным резервуара. В марковском приближении такое уравнение имеет следующий вид:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{h} [H,\rho] + \sum_{i} \left( L_{i}\rho L_{i}^{+} - \frac{1}{2}L_{i}^{+}L_{i}\rho - \frac{1}{2}\rho L_{i}^{+}L_{i} \right), \qquad (1)$$

где H является гамильтонианом системы и  $L_i$  представляют операторы Линд- блада, которые описывают взаимодействие системы с резервуаром [1]. В большинстве случаев не удается найти аналитические решения уравнения (1), и поэтому используются численные методы. Обычно при численных вычислениях матрица плотности записывается через базисные квантовые состояния в гильбертовом пространстве. Такой метод является удобным, когда число базисных состояний m достаточно мало, и не является практичным для больших m, т.к. число элементов матрицы плотности растет как  $m^2$ . Тем не менее, при решении большинства квантово-механических проблем мы вынуждены оперировать с большим числом базисных состояний. В таких случаях очень эффективным оказывается представление матрицы плотности в форме статистического среднего по ансамблю квантовых траекторий. Такой подход оказывается намного более экономичным в компьютерных вычислений. В последние

годы развиты два численных метода вычисления матрицы плотности через среднее по ансамблю квантовых траекторий: метод квантовых скачков, или метод Монте-Карло для вектора состояния, и метод диффузии квантового состояния (ДКС) [2,3]. Если взаимодействие квантовой системы с окружением является достаточно сильным, чтобы привести к эффекту локализации динамических переменных системы, то предпочтительным является другой метод – диффузии квантовых состояний с движущимся базисом [4]. В настоящей работе предложена модификация метода ДКС, которая позволяет существенно сэкономить вычислительные ресурсы в приложениях к исследованию диссипативных квантовых систем.

#### 2. Использование принципа эргодичности в методе ДКС

Основная идея, использованная в предложенном подходе состоит в комбинировании принципа эргодичности в квантовой теории с ДКС-методом квантовых траекторий. Как известно, в методе ДКС используется ансамбль стохастических векторов состояний систем  $|\Psi_{\mathcal{E}}(t)\rangle$ , а матрица плотности представляется в следующем виде:

$$\rho(t) = M\left(\left|\Psi_{\xi}(t)\right\rangle\left\langle\Psi_{\xi}(t)\right|\right) = \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \sum_{\xi}^{N} \left|\Psi_{\xi}(t)\right\rangle\left\langle\Psi_{\xi}(t)\right|.$$
(2)

Здесь *М* означает усреднение по ансамблю, а состояния ансамбля удовлетворяют следующему уравнению для квантовых траекторий:

$$\begin{aligned} \left| d\Psi_{\xi} \right\rangle &= \frac{i}{\hbar} H \left| \Psi_{\xi} \right\rangle dt - \frac{1}{2} \sum_{j} \left( L_{j}^{+} L_{j} + \left\langle L_{j}^{+} \right\rangle \left\langle L_{j} \right\rangle - 2 \left\langle L_{j}^{+} \right\rangle L_{j} \right) \Psi_{\xi} \right\rangle dt + \\ &+ \sum_{j} \left( L_{j} - \left\langle L_{j} \right\rangle \right) \Psi_{\xi} \right\rangle d\xi_{j} , \end{aligned}$$
(3)

где  $\langle L_j \rangle = \langle \Psi_{\xi}(t) | L_j | \Psi_{\xi}(t) \rangle$  и  $d\xi_j$  являются независимыми комплексными случайными переменными, удовлетворяющими условиям

$$M\left(d\xi_{j}\right) = M\left(d\xi_{j}d\xi_{k}\right) = 0, \qquad M\left(d\xi_{j}d\xi_{k}^{*}\right) = \delta_{jk}dt.$$

$$\tag{4}$$

При таком подходе среднее значение произвольного оператора представляется как квантовомеханическое среднее <...> по состоянию  $|\Psi_{\xi}(t)\rangle$  и усреднению по ансамблю траекторий:

$$\overline{F}(t) = M \left\langle \Psi_{\xi}(t) \middle| \hat{F} \middle| \Psi_{\xi}(t) \right\rangle.$$
(5)

Такой подход является очень эффективным при численном моделировании квантовых открытых систем. Некоторые примеры в области квантовой оптики приведены в работах [5-7]. В настоящей работе показывается, что произвольное среднее значение можно представить как среднее по одной из траекторий, однако вычисленной для различных временных интервалов. Действительно, рассмотрим стохастическое состояние  $|\Psi_{\xi}(t)\rangle$  для случайной последовательности временных интервалов, которые для определенности представим в виде возрастающей последовательности  $t_1 < t_2 < .... < t_n$ . Используя последовательность квантовых состояний  $|\Psi_{\xi}(t+t_n)\rangle$ , запишем матрицу плотности в следующем виде:

$$\rho(t) = \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \sum_{n}^{N} \left| \Psi_{\xi}(t+t_{n}) \right\rangle \left\langle \Psi_{\xi}(t+t_{n}) \right|.$$
(6)

Нетрудно непосредственно проверить, что если квантовые состояния  $|\Psi_{\xi}(t)\rangle$ удовлетворяют уравнению (3), то матрица плотности в форме (5) удовлетворяет уравнению (1). Отличие между результатами (2) и (6) состоит в том, что выражение (6) содержит суммирование по случайным временным интервалам одной из квантовых траекторий стохастического процесса  $\xi$  вместо суммирования по ансамблю траекторий, как в формуле (2). Такое заключение является следствием эргодичности квантовой теории, сформулированной для ДКС метода. Иллюстрация метода приводится на рис.1 и 2. Ниже также приводятся применения этого метода к двум диссипативным квантовым системам, которые описываются не зависящим от времени гамильтонианом, а также гамильтонианом, периодическим по времени.

#### 3. Квантовые вычисления для диссипативного нелинейного осциллятора

Хотя приведенные ниже результаты имеют общий характер, для конкретности будет рассмотрен квантовый ангармонический осцилятор под действием вынуждающей силы [5-7]. Квантовая динамика системы описывается уравнением (1) для редуцированной матрицы плотности в представлении взаимодействия, где гамильтониан имеет следующий вид:

$$H = \hbar \Delta a^{+} a + \hbar (f(t)a^{+} + f^{*}(t)a) + \hbar \chi (a^{+}a)^{2}.$$
(7)

Здесь  $a^+$ ,  $a^-$  операторы рождения и уничтожения,  $\Delta = \omega_0 - \omega$  есть расстройка резонанса от собственной частоты осциллятора  $\omega_0$  и  $\chi$  является параметром ангармоничности. В качестве возмущения рассмотрен сигнал на несущей частоте  $\omega$  и с модулированной амплитудой в следующей форме:

$$f(t) = \Omega_1 + \Omega_2 \exp(-i\delta t), \qquad (8)$$

где  $\delta$  есть модуляционная частота,  $\delta \ll \omega$ . Данная система взаимодействует с резервуаром, что приводит к диссипации осцилляторных состояний. Эти эффекты описываются последними членами в уравнении (1), где операторы Линдблада в этом случае равны:  $L_1 = \sqrt{(N_R + 1)\gamma a}$ ,  $L_2 = \sqrt{N_R \gamma a^+}$ , причем,  $\gamma$  является параметром затухания и  $N_R$  обозначает среднее число квантов резервуара. Отметим, что эта модель соответствует модифицированной модели осциллятора Дюфинга и для случая  $\Omega_2 = 0$  преобразуется в обычную модель ангармонического осциллятора под действием монохроматического возмущения.

#### 3.1. Случай стационарного гамильтониана

Эта ситуация может быть реализована, в частности, в приведенной модели осциллятора при отсутствии модуляции,  $\Omega_2 = 0$ . В этом случае гамильтониан (7) не зависит от времени и выражение (6) может быть представлено в более простой, интегральной форме. Для этого в выражении (6) выбираем временные интервалы как  $t_n = t_0 + n\Delta t$  и переходим к пределу  $\Delta t \rightarrow 0$ ,  $n \rightarrow \infty$  при условии, что  $T = N\Delta t$  является конечным. Таким образом, пе-

реходя в выражении (6) от усреднения по дискретным временным интервалам к интегрированию по произвольному интервалу *T*, получаем:

$$\rho(t) = \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} \left| \Psi_{\xi}(t+\tau) \right\rangle \left\langle \Psi_{\xi}(t+\tau) \right| d\tau.$$
(9)

Иллюстрация этого метода на примере вычисления среднего значения чисел заполнения осциллятора  $n = \langle a^+ a \rangle$  приведена на рис.1. Здесь сравниваются результаты вычисления отдельной траектории с результатом усреднения ансамбля траекторий по формуле (2).



Числа заполнений ангармонического осциллятора под действием монохроматического возмущения в зависимости от параметора  $\gamma t$ : а) временная эволюция одной из траекторий для характерных значений параметров, б) среднее значение чисел заполнения в результате суммирования по ансамблю траекторий для этих же параметров. Приведена иллюстрация процедуры выбора случайных временных интервалов.

Другая наша цель состояла в сравнении вычислений среднего значения чисел заполнения осциллятора по формулам (2) и (9). Вычисления показали, что выражение для матрицы плотности (9) приводит к результатам, совпадающим с приведенными на рис.1б только лишь в области временных интервалов  $t >> \gamma^{-1}$ , при  $t_0, T >> \gamma^{-1}$ . Таким образом, можно заключить, что область применения выражения (9) ограничивается временными интервалами, превосходящими переходной режим.

#### 3.2. Случай периодического по времени гамильтониана

Другое интересное представление формулы (6) можно получить для квантовых систем с периодическим по времени гамильтонианом. В этом случае H(t+T) = H(t), поэтому представляется возможным выбрать последовательность временных интервалов следующим образом:  $t_n = nT$  (n = 1, 2, ...). Легко проверить, что эта процедура приводит к следуюшему

результату для матрицы плотности:

$$\rho(t) = \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \sum_{n}^{N} \left| \Psi_{\xi}(t + nT) \right\rangle \left\langle \Psi_{\xi}(t + nT) \right|.$$
(10)

Легко видеть, что именно такой случай реализуется для модели ангармонического осциллятора с амплитудной модуляцией,  $\Omega_2 \neq 0$ , в которой период гамильтониана равен  $T = 2\pi/\delta$ . Приведем результаты численных расчетов чисел заполнения осциллятора для одной траектории (рис.2а) и среднего значения  $n = \langle a^+ a \rangle$  для ансамбля траекторий, вычисленного по формуле (6) рис.26. Анализ показывает, что представление матрицы плотности в форме усреднения по различным участкам траектории (9) действительно приводит к результатам рис.26 для временного интервала  $t \geq 4\gamma^{-1}$ , превосходящего переходной режим.



Рис.2. Численные расчеты для чисел заполнения ангармонического осцилятора под действием возмущения с амплитудной модуляцией для характерных значений параметров: а) временная эволюция одной из траекторий, где указана процедура выбора временных интервалов; б) среднее значение чисел заполнения в результате усреднения по траекториям. Ниже приводится временная зависимость возмущения в произвольных единицах.

Таким образом, можно заключить, что формулировка метода ДКС в рамках усреднения по различным временным интервалам одной из произвольных траекторий аналогична обычному методу ДКС, который основан на стохастическом усреднении, однако, для временных интервалов, соответствующих отрелаксированному режиму. Вместе с этим, очевидно, что приведенный подход, основанный на принципе эргодичности, намного более эффективен для вычислений в области оольших временных интервало. 103воляет существенно сэкономить компьютерное время.

Данная работа поддержана грантом INTAS 04-77-7289.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. C.W.Gardiner. Quantum Noise. Springer, Berlin, 1992.

- 2. N.Gisin, I.C.Percival. J. Phys., A 25, 5677 (1992).
- 3. H.J.Carmichael. An Open Systems Approach to Quantum Optics. Springer, Berlin, 1993.
- 4. R.Schack, T.A.Brun, L.C.Percival. J. Phys., A 28, 5401 (1995).

5. H.H.Adamyan, S.B.Manvelyan, G.Yu.Kryuchkyan. Phys. Rev., A63, 022102 (2001).

6. H.H.Adamyan, S.B.Manvelyan, G.Yu.Kryuchkyan. Phys. Rev., E64, 046219 (2001).

7. G.Yu.Kryuchkyan, S.B.Manvelyan. Phys. Rev. Lett., 88, 094101 (2002).

#### ԷՐԳՈԴԻԿՈՒԹՅՈՒՆԸ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԴԻՍԻՊԱՏԻՎ ՊՐՈՑԵՍՆԵՐԻ ՀԱՄԱԿԱՐԳՉԱՅԻՆ ՄՈԴԵԼԱՎՈՐՈՒՄՈՒՄ

#### Հ.Հ. ԱԴԱՄՅԱՆ, Տ.Վ. ԳԵՎՈՐԳՅԱՆ, Գ.Յու. ԿՐՅՈՒՉԿՅԱՆ

Քվանտային տեսության էրգոդիկության սկզբունքը օգտագործված է քվանտային դիսիպատիվ համակարգերի թվային մոդելավորման, քվանտային հետագծերի նոր մեթոդի մշակման համար։ Այդ նպատակով քվանտային համակարգի խտության մատրիցը ներկայացված է ժամանակային ինտերվալների ըստ անսամբլի քվանտային վիճակների գումարման տեսքով։ Մեթոդը կիրառված է քվանտային անհարմոնիկ տատանակի թվային հաշվարկների համար։

#### ERGODICITY IN COMPUTER MODELING OF QUANTUM DISSIPATIVE PROCESSES

#### H.H. ADAMYAN, T.V. GEVORGYAN, G.Yu. KRYUCHKYAN

The ergodicity of quantum theory is used for modification of quantum trajectories approach proposed for numerical simulation of quantum dissipative systems. For this goal the reduced density operator of a quantum system is represented via an ensemble of quantum states for random time intervals. This approach is illustrated for numerical simulations of a time-modulated anharmonic oscillator.

УДК 539.2

### ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОГО КОЭФФИЦИЕНТА ЭНЕРГИИ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ НАНОСТРУКТУР CdSe1-xSx

#### Д.М. СЕДРАКЯН, П.Г. ПЕТРОСЯН, Л.Н. ГРИГОРЯН, В.Д. БАДАЛЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 3 марта 2006 г.)

Экспериментально и теоретически исследовано влияние размеров сформированных в силикатном стекле нанокристаллов CdSe1-xSx на температурный коэффициент изменения энергии запрещенной зоны полупроводника. Обнаружено, что кривая зависимости температурного коэффициента от размеров нанокристаллов проходит через максимум. Это поведение объяснено уменьшением размеров нанокристаллических включений при нагревании, происходящим за счет более сильного расширения матрицы.

#### 1. Введение

К настоящему времени выполнен ряд экспериментов по изучению зависимости энергии запрещенной зоны от температуры в массивных образцах полупроводниковых систем. В частности, выявлены причины уменьшения ширины запрещенной зоны с ростом температуры [1,2]. В то же время сделано мало подобных исследований для квантовых точек, особенно при температурах выше комнатных. Между тем ожидается, что знание температурного поведения запрещенной зоны наноструктуры даст ценную информацию об электрон-фононном взаимодействии в зависимости от технологии получения низкоразмерных полупроводниковых систем.

В настоящей работе исследовано поведение ширины запрещенной зоны и ее температурного коэффициента сформированных в силикатном стекле нанокристаллов CdSe<sub>1-x</sub>S<sub>x</sub> в зависимости от температуры, размеров включений и технологического режима их получения. Предложена простая феноменологическая теория, которая дает возможность объяснить наблюдаемые особенности поведения изученных материалов.

#### 2. Экспериментальные результаты

Исследуемые образцы с наноструктурными включениями были приготовлены по технологии, описанной в работе [3]. Образцы отличались друг от друга средними размерами полупроводниковых нанокристаллов. Формирование в силикатном стекле нанокристаллов CdSe1-xSx с разными линейными размерами осуществлялось выбором температуры и времени

термообработки. Ширина запрещенной зоны нанокристаллов определялась из оптического спектра поглощения образцов. С этой целью были измерены спектры пропускания и отражения в области температур 20°С – 400°С. В этой области нагрев образцов и дальнейшее их охлаждение до комнатной температуры не вызывали заметных остаточных изменений в спектрах пропускания и отражения. Из этих данных определялась спектральная зависимость коэффициента поглощения K при разных температурах t. При этом учитывалось, что для нанокристаллических включений с радиусами до 3.7 нм действует квадратичный закон дисперсии [4]. Зависимости энергии запрещенной зоны  $E_g$  от температуры были получены по методике [5].



Рис.1. Зависимость энергии запрещенной зоны  $E_g$  от температуры при нагреве образца а) до 400°С, б) выше t = 500°С и последующем охлаждении.

На рис.1а приведена характерная температурная зависимость энергии запрещенной зоны при нагреве образца до 400°С и обратном охлаждении. При нагревании образцов выше 500°С наблюдаются необратимые изменения, которые выражаются смещением края пропускания в длинноволновую область спектра.

На рис.16 показана зависимость энергии запрещенной зоны от температуры, когда образец нагрет выше  $t = 500^{0}$  С. Такой ход зависимости можно объяснить процессами роста и формирования нанокристаллов в расплаве [3].

Измерения показали, что в температурной области 20°С – 400°С зависимость  $E_g(T)$ для нанокристаллов CdSe<sub>1-x</sub>S<sub>x</sub> довольно хорошо описывается формулой Варшни  $E_g(T) = E_g(0) - \alpha T^2 / T + \theta_0$  [6], где  $E_g(0)$  – ширина запрещенной зоны при T = 0 К,  $\theta_0$  – температура Дебая, при  $T >> \theta_0 \alpha$  обычно принимается как температурный коэффициент изменения энергии запрещенной зоны:  $\alpha \approx \partial E_g / \partial T$ .

В массивных образцах CdSe<sub>1-x</sub>S<sub>x</sub> коэффициент  $\alpha$  меняется в пределах –  $(4.64 \div 4.73) \cdot 10^{-4}$  эВ/К. Для исследуемых образцов квантовых точек обычно принимается, что  $\alpha$  от температуры не зависит [7].

Зависимость  $\alpha$  от средних размеров *s* включений для CdSe<sub>1-x</sub>S<sub>x</sub> ранее не исследовалась. Используя методику определения ширины запрещенной зоны, мы попытались исследовать зависимость коэффициента  $\alpha$  от средних размеров включений CdSe<sub>1-x</sub>S<sub>x</sub>.

По результатам измерений  $E_g = E_g(T)$  для образцов с различной длительностью термообработки были построены зависимости коэффициента  $\alpha$  от средних размеров нанокристаллов. Для температуры Дебая было взято значение  $\theta_0 = 150$  [7]. Зависимость  $\alpha$  от среднего размера *s* приведена на рис.2.



Рис.2. Зависимость температурного коэффициента энергии запрещенной зоны от среднего размера нанокристаллов.

Видно, что кривая  $\alpha(s)$  при некотором значении среднего размера нанокристаллов достигает своего максимального значения.

#### 3. Теория

Для объяснения этой особенности  $\alpha$  примем, что, вопреки установленному мнению, средний размер включений зависит от температуры. Представим зависимость  $E_g$  от T в общей форме:

$$E_{g} = \frac{F(T)}{s^{2}(T)} + E_{g}^{0}(T) , \qquad (1)$$

где F(T) – некоторая функция от температуры, s(T) – средний размер нанокристаллических включений, зависящий от T,  $E_g^0(T)$  – энергия запрещенной зоны массивного полупроводника.

Используя определение  $\alpha$ , вычислим производную

$$\frac{dE_g}{dT} = \frac{1}{s^2(T)} \frac{dF}{dT} - \frac{2F}{s^3(T)} \frac{ds}{dT} + \frac{dF_g^0}{dT}.$$
(2)

Введем следующие обозначения:

$$f(s) = -\frac{dE_g}{dT} , \qquad A = -\frac{dF}{dT} , \qquad B = -2Fds/dT , \qquad f^0 = -\frac{dE_g^0}{dT} . \tag{3}$$

Тогда из (2) получим

$$f(s) = \frac{A}{s^2} - \frac{B}{s^3} + f^0.$$
 (4)

Средний размер  $s_0$  включений, при котором  $f = f_{max}$ , найдем из условия максимума f'(s) = 0, откуда получим  $s_0 = 3B/2A$ . Максимальное значение f, согласно (4), равняется

$$f_{\max} = f(s_0) = \frac{4A^3}{27B^2} + f^0.$$
 (5)

Параметры A и B можно выразить через  $f(s_0)$  и  $s_0$ :

$$A = 3[f(s_0) - f^0]s_0^2, \qquad B = 2[f(s_0) - f^0]s_0^3.$$
(6)

Теоретическое определение величин A и B весьма сложно для практических вычислений. Для этого необходимо знание констант электрон-фононного взаимодействия в конкретной наноструктуре. Поэтому кажется целесообразным применить чисто эмпирический подход к подбору параметров для функции f(s). Сопоставление теоретических и экспериментальных кривых показало, что наилучшее совпадение получается при следующих параметрах:

$$s_0 = 19.5 \text{ E}$$
,  $f(s_0) = 8,5 \cdot 10^{-4} \text{ sB} \cdot \text{K}$ ,  $f^0 = 2,8 \cdot 10^{-4} \text{ sB} \cdot \text{K}$ 

Отметим, что полученное здесь значение  $f^{0}$  для массивного образца CdSe<sub>1-x</sub>S<sub>x</sub> находится в хорошем согласии с ранее известными данными (см. [8]).

При аппроксимации экспериментальной кривой  $\alpha(s)$  функцией (4) нами было принято, что A и B являются константами; дополнительно предполагалось, что ds/dT < 0. Из свойства A = const следует, что зависимость F от T линейна. Из-за слабой зависимости размеров s от температуры зависимость  $E_g$  нанокристалла от T должна быть близка к линейной, что и наблюдается в эксперименте. Представим зависимость F от T в следующем виде:

$$F(T) = F_0 - A \cdot T , \qquad (7)$$

где  $F_0$  – некоторая постоянная.

Преобразуем равенство (7). Запишем формулу (7) для комнатной температуры  $T = T_0$ и введем приведенную температуру  $\tau = T/T_0$ . Тогда формулу (7) можно записать в виде

$$F(\tau) = F(T_0) \frac{\tau_1 - \tau}{\tau_1 - 1},$$
(8)

где  $\tau_1$  – та точка, в которой  $F(\tau)$  обращается в нуль. Сравнивая (7) и (8), находим, что

$$F_0 = F(T_0) \frac{\tau_1}{\tau_1 - 1} , \qquad A = \frac{F(T_0)}{T_0(\tau_1 - 1)}.$$
(9)

Попробуем вычислить средний коэффициент линейного расширения  $s_0^{-1} ds/dT$  нанокристаллических включений. Используя определение *B* и учитывая, что в исследуемом диапазоне функция F(T) относительно  $F_0$  мало изменяется, можно F(T) заменить на  $F_0$ . Тогда с учетом (6),(9) получим

$$\frac{1}{s_0}\frac{ds}{dT} = -\frac{(\tau_1 - 1)[f(s_0) - f^0]s_0^2}{\tau_1 F(T_0)} \,. \tag{10}$$

С другой стороны, из определения А и формул (6), (9) имеем

$$\tau_1 = 1 + \frac{F(T_0)}{3T_0[f(s_0) - f^0]s_0^2}.$$
(11)

Сравнение (10),(11) приводит к формуле

$$\frac{1}{s_0}\frac{ds}{dT} = -\frac{1}{3\tau_1 T_0} \ . \tag{12}$$

Для оценки коэффициента линейного расширения по формуле (12) нам потребуется знание величины  $F(T_0)$  из независимых экспериментов.

Ввиду отсутствия в настоящее время требуемых экспериментальных данных, мы попытались оценить величину  $F(T_0)$  теоретически. Как известно, в простейшем приближении нанокристаллическое включение (т.е. квантовую точку) можно смоделировать

потенциальной ямой в виде шара. По этой модели разницу между нижним уровнем зоны проводимости и верхним уровнем валентной зоны можно вычислить по формуле  $E_g = \pi^2 \hbar^2 / 2\mu s^2 + E_g^0$ , где первый член характеризует размерно-квантовый эффект наноструктуры,  $\mu$  – приведенная масса электрона и дырки. Сравнение последней формулы с (1) позволяет принять, что  $F(T_0) \cong \pi^2 \hbar^2 / 2\mu = 229$  эВ(Е<sup>2</sup>. Необходимо, однако, отметить, что это значение для F получено при предположении о "гладкости" дна потенциальной ямы. В действительности электроны взаимодействуют с атомами решетки наноструктуры. Чтобы выяснить, насколько взаимодействие меняет численное значение F, наноструктура как система с несколькими эквидистантными барьерами помещалась на дне потенциальной ямы. Энергетические уровни, возникающие при этом, определялись по методу, предложенному в работе [9]. Принималось, что средний размер квантовой ямы равняется  $s_0=19.5$  Е. Это примерно соответствует структуре с 4-мя потенциальными барьерами. Результаты численного расчета величины F от высоты V потенциальных барьеров приведены на рис.3.



Рис.3. Зависимость F от высоты V потенциальных барьеров.

Из рисунка видно, что функция *F* слабо зависит от высоты потенциальных барьеров: при изменении *V* от нуля до 0.2 эВ *F* меняется в пределах 245–265 эВ·Е<sup>2</sup>. Для оценки коэффициента  $s_0^{-1} ds/dT$  возьмем среднее от приведенных значений *F*. При  $\tau_1 = 2.28$  и  $T_0 = 300$  К получаем

$$\frac{1}{s_0} \frac{ds}{dT} \approx 4.8 \cdot 10^{-4} \,\mathrm{K}^{-1} \,. \tag{13}$$

Попробуем связать коэффициент линейного расширения наноструктуры с аналогичным коэффициентом матричного вещества (силикатного стекла). Выделим мысленно в образце стержень с длиной  $L_0 \approx 5$  мм. Обозначим через L суммарную длину силикатного стекла и через l = ns длину наноструктурных включений (n – число включений). Длина образца равняется

$$L_0 = L + ns . (14)$$

При нагревании стержня на один градус изменение линейных размеров  $\Delta L$  незначительно ( $\Delta L \ll L_0$ ), поэтому для качественной оценки можно считать, что  $L_0 = \text{const.}$  Дифференцируя (14) по T, получим

$$\frac{dL}{dT} = -n\frac{ds}{dT} \ . \tag{15}$$

Последнее соотношение можно преобразовать к виду

$$\frac{1}{s_0}\frac{ds}{dT} = -\frac{L}{L_1}\frac{1}{L}\frac{dL}{dT} ,$$
 (16)

где  $L_1 = ns_0$  – средняя суммарная длина полупроводникового вещества,  $L^{-1} dL/dT$  – коэффициент линейного расширения силикатного стекла. Оценим отношение  $L/L_1$ . Если  $m_1 = \rho_1 V_1$  – масса растворенного в стекле полупроводникового вещества, а  $m = \rho V$  – масса стекла, то

$$\frac{L}{L_{\rm l}} \approx \left(\frac{V}{V_{\rm l}}\right)^{\frac{1}{3}} = \left(\frac{\rho_{\rm l}}{\rho}\right)^{\frac{1}{3}} \cdot \left(\frac{m}{m_{\rm l}}\right)^{\frac{1}{3}}.$$
(17)

При подготовке образцов полупроводник и стекло смешивались в пропорции 1:100; кроме того, известно, что степень растворимости полупроводникового вещества в стекле меньше 0.1% [10]. Следовательно, получается, что  $(m/m_1)^{1/3} \ge 10$ . Учитывая также, что для силикатного стекла  $L^{-1} dL/dT \approx 10^{-5}$  K<sup>-1</sup>,  $\rho_1 \approx 5$  г/см<sup>3</sup>,  $\rho \approx 2.5$  г/см<sup>3</sup>, из (16) получим, что

$$\frac{1}{s_0} \frac{ds}{dT} > 1.3 \cdot 10^{-4} \,\mathrm{K}^{-1} \,.$$

Это последнее число согласуется с величиной (13), являющейся результатом использования экспериментальных данных и теоретического расчета. Таким образом, подтверждается основное предположение о том, что причиной необычного поведения температурного коэффициента ширины запрещенной зоны нанокристалла CdSe<sub>1-x</sub>S<sub>x</sub> является уменьшение средних размеров нанокристаллических включений под влиянием теплового расширения силикатного стекла.

Данная работа выполнена в рамках Армянской государственной программы "Полупроводниковая наноэлектроника".

#### ЛИТЕРАТУРА

- 1. H.Y.Fan. Phys. Rev., 82, 900 (1951).
- 2. Б.Ридли. Квантовые процессы в полупроводниках. М., Мир, 1986.
- 3. L.Grigoryan, P.Petrosyan, S.Petrosyan, V.Bellani, F.Maglia. Eur. Phys. J. B, 34, 415 (2003).
- 4. **Н.Р.Кулиш, В.П.Кунец, М.П.Лисица, Н.И.Малыщ.** Укр. физ. журн., **37**, 1141 (1992).
- 5. N.R.Kulish, V.P.Kunets, M.P.Lisitsa. Superlattices and Microstructures, 22, 341 (1997).
- 6. Y.P.Varshni. Physica, 34, 149 (1967).

- 7. Физико-химические свойства полупроводниковых веществ. Справочник. М., Наука, 1979
- 8. В.П.Кунец, Н.Р.Кулиш, Вас.П.Кунец и др. ФТП, 36, 227 (2002).
- D.M.Sedrakian, A.Zh.Khachatrian, V.D.Badalyan, G.M.Andreasyan. Optical and Quantum Electronics, 36, 893 (2004).
- 10. В.А.Гайсин, С.В.Карпов, Е.В.Колобкова, Р.Б.Новиков и др. ФТТ, **41**, 1505 (1999).

#### CdSe1-xSx ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴՉԱՅԻՆ ՆԱՆՈԿԱՌՈՒՑՎԱԾՔՆԵՐԻ ԱՐԳԵԼՎԱԾ ԳՈՏՈՒ ԷՆԵՐԳԻԱՅԻ ՋԵՐՄԱՍՏԻՃԱՆԱՅԻՆ ԳՈՐԾԱԿՑԻ ՀԵՏԱԶՈՏՈՒՄԸ

#### Դ.Մ. ՍԵԴՐԱԿՅԱՆ, Պ.Գ. ՊԵՏՐՈՍՅԱՆ, Լ.Ն. ԳՐԻԳՈՐՅԱՆ, Վ.Դ. ԲԱԴԱԼՅԱՆ

Ուսումնասիրված է սիլիկատային ապակում ձևավավորված CdSeւ<sub>∗</sub>S<sub>∗</sub> նանոբյուրեղների արգելված գոտու էներգիայի ջերմաստիձանային գործակցի վարքը, կախված նրանցում նանոբյուրեղների չափսերից։ Ցույց է տրված, որ ջերմաստիձանային գործակցի կախվածությունը նանոբյուրեղների չափերից մաքսիմումով կոր է և այն կարելի է բացատրել տաքացման ժամանակ նանոբյուրեղների չափսերի փոքրացմամբ` ի հաշիվ մատրիցայի ընդարձակման։

## INVESTIGATION OF THE TEMPERATURE COEFFICIENT OF THE FORBIDDEN BAND ENERGY OF $CdSe_{1-x}S_x$ SEMICONDUCTOR NANOSTRUCTURES

#### D.M. SEDRAKIAN, P.G. PETROSYAN, L.N. GRIGORYAN, V.D. BADALYAN

The dependence of the band-gap energy temperature coefficient on the average size of  $CdSe_{1-x}S_x$  nanocrystals embedded in silicate glass, is investigated experimentally and theoretically. It is revealed that the temperature coefficient dependence on the sizes of nanocrystals has a maximum. This behavior is explained by the reduction of nanocrystalline inclusion sizes at heating.

УДК 531.19

#### МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА <sup>3</sup>Не НА РЕКУРСИВНЫХ РЕШЕТКАХ

#### Л.Н. АНАНИКЯН

#### Ереванский физический институт

#### (Поступила в редакцию 21 июля 2006 г.)

Рассмотрена модель Гейзенберга на рекурсивных решетках с мультиспиновым взаимодействием в сильном внешнем магнитном поле как приближение двумерной решетки кагоме, а также рекурсивная шестиугольная решетка как приближение треугольной решетки для твердого <sup>3</sup>Не. Модель Гейзенберга в сильном внешнем магнитном поле можно аппроксимировать моделью Изинга. Используя динамический метод, получены рекуррентные соотношения для статистической суммы. Построены графики зависимости намагниченности от внешнего поля при различых константах обменного взаимодействия и температурах. Получены магнитные плато, бифуркации и удвоения.

#### 1. Введение

Исследование физических свойств твердого гелия <sup>3</sup>Не играет важную роль в изучении спиновых систем. Слой <sup>3</sup>Не, нанесенный на графитовую поверхность, является хорошим примером двумерной квантовой спиновой системы [1]. Первый атомный слой образует треугольную систему со спином 1/2, в следующих слоях одна из связей исчезает и образуется решетка кагоме [2]. Во многих экспериментальных [3] и теоретических [4] работах было показано, что в таких системах преобладает связь между более чем двумя спинами и имеет место переход системы от ферромагнитного к антиферромагнитному состоянию.

В последнее время особое внимание уделяется изучению плат намагниченности в сильном магнитном поле, так как, по существу, это макроскопическое квантовое явление. Как известно, плато намагниченности не связано с насыщением. В квантовых спиновых системах при близких к нулю температурах может появиться плато в кривой намагниченности при сильных магнитных полях [5]. Значение намагниченности, при котором появляется плато, рационально по отношению к значению насыщения. Теоретическое объяснение данному факту было дано в 1997г. Ошикава, Яманака и Аффлеком [6]. Геометрически несогласованные (фрустрированные) квантовые магнетики – это класс магнетиков, обладающих необычными свойствами при низких температурах и высоких давлениях. Многие из изученных квантовых магнетиков представляют собой решетку кагоме антиферромагнитно связанных ближайших спинов. Как было указано выше, некоторые слои <sup>3</sup>Не образуют решетку кагоме. Обычно антиферромагнитнытые решетки кагоме исследуются численным моделированием [7].

В данной работе предложен динамический метод, основанный на точном рекуррентном соотношении для статистической суммы [8]. Рассмотрены дерево Хусими, которое является приближением решетки кагоме, а также рекурсивная шестиугольная решетка, которая является приближением треугольной. Этот метод позволяет изучить магнитные плато, бифуркации и удвоения в антиферромагнитном случае при низких температурах и высоких давлениях.

#### 2. Гамильтониан с мультиспиновым обменным взаимодействием

Гамильтониан, описывающий <sup>3</sup>Не в магнитном поле, имеет следующий вид:

$$H = H_{ex} + H_Z, \qquad (1)$$

где  $H_Z$  отвечает за магнетизм,  $H_{ex}$  – за обменное взаимодействие. Взаимодействие с внешним магнитным полем описывается зеемановским членом

$$H_Z = -\sum_i \frac{\gamma}{2} \hbar B \cdot \sigma_i , \qquad (2)$$

где  $\gamma$  – гиромагнитное отношение атомов <sup>3</sup>He.

Общий вид гамильтониана, описывающего мультичастичное обменное взаимодействие, приведен в [1]:

$$H_{ex} = -\sum_{n,\alpha} J_{n\alpha} (-1)^p P_n .$$
(3)

Здесь суммирование идет по всем перестановкам частиц,  $P_n$ -оператор перестановок *n* частиц,  $J_{n}$  – соответствующая энергия обмена (положительная),  $\alpha$  характеризует топологически отличающиеся циклы и *p* определен в теории групп перестановок. В частном случае

$$H_{ex} = J_2 \sum_{pairs} (P_2 + P_2^{-1}) - J_3 \sum_{triangles} (P_3 + P_3^{-1}),$$
(4)

где в первом члене суммирование идет по всем соседним парам, а во втором – по всем треугольникам. Этот случай будет использован для дерева Хусими.

Выражение для оператора *Р*<sub>і</sub> было получено Дираком [9]:

$$P_{ij} = \frac{1}{2} (1 + \sigma_i \cdot \sigma_j), \qquad (5)$$

где  $\sigma_i$  – матрицы Паули, действующие на *i*-ый спин. Легко заметить, что  $P_2^{-1} = P_2$ , для n > 2это уже не верно. Однако остальные операторы  $P_n$  можно выразить через  $P_2$ . Для оператора перестановки трех спинов получим:

$$P_{ijk} = P_{ij} \cdot P_{ik} = \frac{1}{4} (1 + \sigma_i \cdot \sigma_j) (1 + \sigma_i \cdot \sigma_k) .$$
(6)

Используя свойства матриц Паули, имеем:

$$P_{ijk} + (P_{ijk})^{-1} = \frac{1}{2} (1 + \sigma_i \cdot \sigma_j + \sigma_j \cdot \sigma_k + \sigma_k \cdot \sigma_i).$$
<sup>(7)</sup>

#### 3. Приближение решетки кагоме деревом Хусими. Плато намагниченности, бифуркации и удвоения

Для получения рекуррентного соотношения необходимо заменить решетку кагоме иерархической (рекурсивной) решеткой Хусими (дерево Хусими). Дерево Хусими представляет собой решетку, изображенную на рис.1. Модель характеризуется числом  $\gamma$  – количеством треугольников, исходящих из каждой вершины. Преимущество этой модели заключается в том, что решетку можно разбить на  $\gamma$  одинаковых ветвей, содержащих  $\gamma$ –1 ветвей. Таким образом можно получить точное рекуррентное уравнение для статистической суммы. В сильном магнитном поле, направленном вдоль оси z, спины в основном выстраиваются параллельно или антипараллельно магнитному полю. Значит, в этом случае квантовую модель Гейзенберга можно заменить моделью Изинга со спином  $S_i = \pm 1$  [6]. Статистическая сумма может быть записана в виде



(8)

Рис.1. Дерево Хусими при  $\gamma = 3$ .

Здесь S<sub>0</sub> – центральный спин,  $h = \beta(\gamma/2)\hbar B$ ,  $\beta = 1/kT$ ,  $g_n(s_0)$  – статистический вес одной из ветвей решетки, выходящей из центрального узла, n – число поколений. В термодинамическом пределе  $n \to \infty$  можно пренебречь поверхностными эффектами, т.е. мы изучаем термодинамику глубоко внутри решетки Хусими. Рекуррентное соотношение для одной ветви будет:

$$g_{n}(s_{0}) = \sum_{\{s_{1},s_{2}\}} \exp[J(s_{0}s_{1} + s_{0}s_{2} + s_{1}s_{2}) + h(s_{1} + s_{2})] \cdot g_{n-1}(s_{1})^{\gamma-1} \cdot g_{n-1}(s_{2})^{\gamma-1}, \quad (9)$$

где введено обозначение  $J = \beta \frac{(J_3 - J_2)}{2}$ .

Из уравнения (9) имеем:

$$g_{n}(+) = e^{3J+2h} g_{n-1}^{2(\gamma-1)}(+) + 2e^{-J} g_{n-1}^{\gamma-1}(-) g_{n-1}^{\gamma-1}(+) + e^{-J-2h} g_{n-1}^{2(\gamma-1)}(-), \qquad (10)$$

$$g_{n}(-) = e^{-J+2h} g_{n-1}^{2(\gamma-1)}(+) + 2e^{-J} g_{n-1}^{\gamma-1}(-) g_{n-1}^{\gamma-1}(+) + e^{3J-2h} g_{n-1}^{2(\gamma-1)}(-).$$
(11)

Введем новую переменную  $x_n = g_n(+) / g_n(-)$ . После простых преобразований получим рекуррентное уравнение:

$$x_n = f(x_{n-1}), \qquad f(x) = \frac{z\mu^2 x^{2(\gamma-1)} + 2\mu x^{(\gamma-1)} + 1}{\mu^2 x^{2(\gamma-1)} + 2\mu x^{(\gamma-1)} + z}, \tag{12}$$

где  $z = e^{4J}$ ,  $\mu = e^{2h}$ . Величина  $x_n$  не имеет конкретного физического смысла, но термодинамические функции могут быть выражены в терминах  $x_n$ . Например, намагниченность может быть представлена в виде

$$M = \frac{\mu x^{\gamma} - 1}{\mu x^{\gamma} + 1}.$$
 (13)

Т.е. зафиксировав температуру и константы парного и тройного взаимодействия, можно, проделав достаточное количество итераций (12), получить зависимость намагниченности от внешнего поля. Мы приближаем решетку кагоме рекурсивной решеткой Хусими с y = 2 (рис.2). При фиксированной температуре T = 1 mK получаются графики, показанные на рис.3. При J=0.5 mK и J=4 mK намагниченность ведет себя стандартно, кривая намагниченности монотонно растет с повышением магнитного моля. При J=8 mK появляется плато намагниченности в  $m = \pm 1/3$  (рис.3с), а при J = 18 mK появляются четыре бифуркационные точки и удвоение (рис.3d).



Рис.2. Приближение решетки кагоме рекурсивной решеткой Хусими



Рис.3. Зависимость намагниченности от внешнего поля при разных значениях J, при температуре T = 1 mK. (a) J = 0.5 mK, (b) J = 4 mK, (c) J = 8 mK, (d) J = 18 mK.

#### 4. Приближение треугольной решетки рекурсивной шестиугольной решеткой

Как было сказано выше, первый слой <sup>3</sup>Не образует треугольную решетку. Такую решетку тоже можно заменить рекурсивной решеткой. В данном случае используется шестиугольная рекурсивная решетка (рис.4). Для нее, аналогично предыдущему параграфу, можно получить рекуррентное соотношение для статистической суммы. Однако в этом случае в гамильтониане обменного взаимодействия, помимо парных и тройных взаимодействий, учитываются также четверные, пятерные и шестерные взаимодействия [10]. И аналогичным образом получается функция зависимости намагниченности от внешнего поля. Из-за громоздкости формул приведем только графики намагниченности (рис.5). Надо отметить, что намагниченность центрального узла шестиугольника отличается от намагниченности вершин. На графике изображены средние намагниченности. Как видно из графиков, при высоких температурах кривая намагниченности плавно возрастает (рис.5а), с понижением температуры образуются плато в  $m = \pm 2/3$ , бифуркационная точка и удвоение (рис.5b). На рис.5с учтены только парные и тройные взаимодействия, опять образуются плато в  $m = \pm 2/3$ , бифуркационная точка и удвоение. Экспериментально измерить отдельно каждую константу взаимодействия невозможно. Известно лишь, что для треугольной решетки  $J_3 > J_2 > J_4 \ge J_6 > J_5$ . График, удовлетворяющий этим условиям, изображен на рис.5d.



Рис.4. Приближение треугольной решетки рекурсивной шес тиугольной решеткой.



Рис.5. Зависимость намагниченности от внешнего поля для шестиугольной рекурсивной решетки. (a) T = 10 mK,  $f_2 = 2$ ,  $f_3 = 2.5$ ,  $f_4 = 1.8$ ,  $f_5 = 0.5$ ,  $f_6 = 1$ ; (b) T = 0.1 mK,  $f_2 = 2$ ,  $f_3 = 2.5$ ,  $f_4 = 1.8$ ,  $f_5 = 0.5$ ,  $f_6 = 1$ ; (c) T = 0.1 mK,  $f_2 = 2$ ,  $f_3 = 2.5$ ,  $f_4 = J_5 = J_6 = 0$ ; (d) T = 0.1 mK,  $f_2 = 2$ ,  $f_3 = 2.5$ ,  $f_4 = J_5 = J_6 = 0$ ; (d) T = 0.1 mK,  $f_2 = 2$ ,  $f_3 = 2.5$ ,  $f_4 = J_5 = J_6 = 0$ ; (d) T = 0.1 mK,  $f_2 = 2$ ,  $f_3 = 2.3$ ,  $f_4 = 1$ ,  $f_5 = 0.1$ ,  $f_6 = 0.5$ .

#### ٤. Заключение

### Таким образом, мы показали, что в антиферромагнитном случае при низких



температурах существуют плато намагниченности, бифуркационные точки и удвоения. При этом существенную роль играют точные рекуррентные соотношения для статистической суммы, которые можно получить, заменив кагоме и треугольную решетку рекурсивными Хусими и шестиугольной решетками. В дальнейшем было бы интересно исследовать нули Янг-Ли статистической суммы на плато и в бифуркационых точках.

#### ЛИТЕРАТУРА

- M.Roger, J.H.Hetherington, J.M.Delrieu. Rev. Mod. Phys., 55, 1 (1983); H.Franco, R.Rapp, H.Godfrin. Phys. Rev. Lett., 57, 1161 (1986); H.Godfrin, R.Ruel, D.Osheroff. Phys. Rev. Lett., 60, 305 (1988); H.Godfrin, R.E.Rapp. Adv. Phys., 44, 113 (1995).
- H.Jichu, K.Kuroda. Prog. Theor. Phys., 67, 715 (1982); R.A.Gayer. Phys. Rev. Lett., 64, 1919 (1990);
   M.Roger. Phys. Rev. B, 56, R2928 (1997).
- M.Siquera, J.Nyeki, B.Cowan, J.Saunders. Phys. Rev. Lett., 76, 1884 (1996); K.Ishida, M.Morishita, K.Yawata, H.Fukuyama. Phys. Rev. Lett., 79, 3451 (1997); M.Roger, C.Bauerle, Yu.M.Bunkov, A.-S.Chen, H.Godfrin, Phys. Rev. Lett., 80, 1308 (1998).
- J.M.Delrieu, M.Roger, J.H.Hetherington. J. Low Temp. Phys., 40, 71 (1980); M.Roger. Phys. Rev. B, 30, 6432 (1984); B.Bernu, D.Ceperley, C.Lhuillier. J. Low Temp. Phys., 89, 589 (1992).
- 5. T.Momoi, H.Sakamoto, K.Kubo. Phys. Rev. B, 59, 9491 (1999).
- 6. M.Oshikawa, M.Yamanaka, I.Affleck. Phys. Rev. Lett., 78, 1984 (1997).
- C.Zeng, V.Elser. Phys. Rev. B, 51, 8318 (1995); P.W.Leung, V.Elser. Phys. Rev. B, 47, 5459 (1993);
   Ch.Waldtmann et al. Eur. Phys. J. B, 2, 501 (1998).
- T.A.Arakelyan, V.R.Ohanyan, L.N.Ananikyan, N.S.Ananikian, M.Roger. Phys. Rev. B, 67, 024424 (2003);
   N.S.Ananikian, S.K.Dallakian, B.Hu. Complex Systems, 11 213 (1997);
   N.S.Ananikian et al. Physica A, 172, 391 (1991).
- P.A.M.Dirac. The Principles of Quantum Mechanics. Clarendon Press, Oxford, 1947.
   10. H.Godfrin, D.D.Osheroff. Phys. Rev. B, 38, 4492 (1988).

#### <sup>3</sup>He-ի ՄԱԳՆԻՍԱԿԱՆ ՀԱՏԿՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԸ ՌԵԿՈՒՐՍԻՎ ՑԱՆՑԵՐԻ ՎՐԱ

#### Լ.Ն. ԱՆԱՆԻԿՅԱՆ

Ռեկուրսիվ ցանցերի վրա դիտարկված է <sup>3</sup>He-ի բազմամասնիկային փոխազդեցություններով Հայզենբերգի մոդելը, որպես երկչափ կագոմէ ցանցի մոտարկում, ինչպես նաև ռեկուրսիվ վեցանկյուն ցանցը, որպես եռանկյուն ցանցի մոտարկում: Ուժեղ մագնիսական դաշտում Հայզենբերգի մոդելը կարելի է մոտարկել Իզինգի մոդելով: Կիրառելով դինամիկ մեթոդը` ստացված են ռեկուրենտ հավասարումներ վիճակագրական գումարի համար: Կառուցված են մագնիսացման կախվացության գրաֆիկները արտաքին մագնիսական դաշտից տարբեր փոխազդեցության հաստատունների և ջերմաստիճանների համար: Ստացված են մագնիսացման պլատոներ, բիֆուրկացիոն կետեր և կրկնապատկումներ:

#### MAGNETIC PROPERTIES OF <sup>3</sup>He ON THE RECURSIVE LATTICES

#### L.N. ANANIKIAN

We considered the Heisenberg model on the recursive lattices with multi-spin interaction in a strong magnetic field as an approximation of the two-dimensional kagome lattice, as well as hexagonal recursive lattices as an approximation of triangular lattice, for solid <sup>3</sup>He. In the strong magnetic field it is possible to approximate the Heisenberg model with the Izing one. Using dynamic approach, we obtain exact recursion relations for partition functions. Diagrams of the magnetization versus external magnetic field with different spin-exchange parameters and temperatures are presented. Magnetization plateau, bifurcation points and doublings are obtained.

УДК 548.0

### ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГИРОТРОПНЫХ КРИСТАЛЛОВ В УЛЬТРАЗВУКОВОМ ПОЛЕ. II. СОБСТВЕННЫЕ ПОЛЯРИЗАЦИИ И СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ

#### Э.М. АРУТЮНЯН<sup>1</sup>, С.О. АРУТЮНЯН<sup>1</sup>, А.А. ГЕВОРГЯН<sup>2</sup>

#### <sup>1</sup>Институт прикладных проблем физики НАН Армении

<sup>2</sup>Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 24 мая 2006 г.)

Рассмотрено наклонное распространение света через слой гиротропного кристалла, находящегося в ультразвуковом поле. Задача решена методом сложения слоев Амбарцумяна. Приведены результаты изучения особенностей собственных поляризаций (СП) и собственных значений передаточной функции для комплексной амплитуды. Обнаружено изменение знака эллиптичности СП при больших углах падения.

#### 1. Введение

В последнее время большой интерес вызывают фотонные кристаллы (ФК) [1,2] ( особый класс искусственных структур с периодическим изменением диэлектрических свойств на пространственном масштабе порядка оптической длины волны. Такие структуры широко используются в современной интегральной оптике и оптоэлектронике, в лазерной и рентгеновской технике, в технике миллиметрового и субмиллиметрового диапазона длин волн, в антенной технике, в оптической связи. Важнейшим свойством ФК является зонная структура их спектра, аналогичная энергетической зонной структуре электронов в полупроводниках. Особый интерес представляют самоорганизующиеся структурнохиральные ФК (холестерические жидкие кристаллы, хиральные смектические жидкие кристаллы) и искусственно-созданные (методом вакуумного напыления) хиральносконструированные тонкослойные структуры (из-за более богатых оптических свойств. Для этих кристаллов фотонная запрещенная зона существует только для света с одной круговой поляризацией (при нормальном падении света), совпадающей со знаком хиральности среды. Здесь селективное по отношению поляризации дифракционное отражение наблюдается в спектральной области от  $\lambda_1 = \sigma n_0$  до  $\lambda_2 = \sigma n_e$ , где  $\sigma$  - шаг спирали,  $n_0 = \sqrt{\varepsilon_{II}}$  и  $n_e = \sqrt{\varepsilon_{II}}$  локальные коэффициенты преломления для обыкновенного и необыкновенного лучей, соответственно. Однако периодическое изменение параметров хиральной среды можно осуществлять также внешним ультразвуковым полем. Взаимодействие световых и ультразвуковых волн в кристаллах находит широкое применение для управления

параметрами световых пучков и исследования физических свойств вещества [3-10]. В настоящее время для изготовления акустооптических устройств обработки информации (модуляторов, дефлекторов, фильтров, процессоров, датчиков и т.д.) широкое применение находят кристаллы, обладающие как хорошими фотоупругими свойствами, так и гиротропией. К таким кристаллам в первую очередь относятся парателлурит (TeO<sub>2</sub>), теллур (Te), кварц ((-SiO<sub>2</sub>) и др. В последние годы интерес к исследованиям распространения электромагнитной волны в периодических хиральных средах значительно возрос. В работах [11-13] исследованы особенности распространения электромагнитной волны через периодическую хиральную среду при нормальном падении. В [14] рассмотрено отражение света от границы структуры периодически возмущенная нехиральная среда – хиральная среда. В работах [15,16] развит 4х4 матричный метод для хиральных многослойников. В [17] применен метод 4х4 Δ-матрицы Берремана. В [18] исследованы особенности структуры фотонных запрещенных зон в хиральных многослойных структурах.

В работе [19] для решения аналогичной задачи применен модифицированный метод сложения слоев Амбарцумяна, решена граничная задача для конечного слоя гиротропного кристалла, находящегося в ультразвуковом поле, изучены его дифракционные свойства, а также отмечена возможность применения этих систем в качестве поляризационных фильтров и зеркал.

В данной работе мы продолжим исследования, начатые в [19], и представим результаты исследования особенностей СП и собственных значений для конечного слоя гиротропного кристалла, находящегося в ультразвуковом поле.

Как известно, СП – это две поляризации, которые не изменяются при прохождении света через систему, а собственные значения – это значения передаточной функции для комплексной амплитуды, соответствующие СП [20]. СП и собственные значения дают много информации об особенностях взаимодействия света с системой и поэтому в оптике и особенно в эллипсометрии важное значение имеет вычисление СП и собственных значений для каждой оптической системы. Из определения СП следует, что они должны быть связаны с поляризациями внутренних волн (собственных мод), возбуждаемых в среде. Как показывают наши исследования, СП практически совпадают с поляризациями собственных мод. Однако, в общем случае существуют и определенные отличия: существуют только две СП, тогда как число собственных мод может быть больше двух, причем поляризации всех этих мод могут отличаться друг от друга (например, для невзаимных сред). В СП учтены влияния диэлектрических границ. Из сказанного следует, что исследование особенностей СП особенно важно в случае неоднородных сред, для которых неизвестно точное решение задачи.

В данной работе представлены результаты детального анализа особенностей СП и собственных значений при наклонном падении для гиротропного кристалла, находящегося в ультразвуковом поле.

#### 2. Теория

Рассмотрим отражение и пропускание света через конечный слой гиротропного кристалла, находящегося в ультразвуковом поле. Пусть слой среды занимает пространство между плоскостями z = 0 и z = d (d – толщина слоя). Плоская ультразвуковая волна распространяется вдоль оси z. Она превращает параметры  $\varepsilon$ ,  $\mu$  и  $\overline{\gamma}$  в функции от координаты z ( $\varepsilon$ ,  $\mu$  – диэлектрическая и магнитная проницаемости,  $\overline{\gamma}$  – параметр естественной гиротропии этого слоя) [19]. Здесь мы будем предполагать следующие законы изменения этих параметров:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon(z) \\ \mu(z) \\ \overline{\gamma}(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon \\ \mu \\ \overline{\gamma} \end{pmatrix} \left[ 1 + \begin{pmatrix} \Delta \varepsilon \\ \Delta \mu \\ \Delta \overline{\gamma} \end{pmatrix} \sin(Kz) \right],$$
(1)

где глубины модуляции  $\Delta \varepsilon$ ,  $\Delta \mu$  и  $\Delta \overline{\gamma}$  предполагаются малыми по отношению к единице величинами,  $K = 2\pi / \Lambda$ ,  $\Lambda - длина ультразвуковой волны. Плоскость падения света совпадает с плоскостью ($ *x*,*z* $), а волна падает под углом <math>\alpha$  к нормали границы слоя, совпадающей с плоскостью (*x*,*z*). Разложим компоненты амплитуд электрических полей падающей, отраженной и прошедшей волн на проекции, параллельные (*p*-поляризация) и перпендикулярные (*s*-поляризация) плоскости падения:

$$\mathbf{E}_{i,r,t} = E_{i,r,t}^{p} \mathbf{n}_{p} + E_{i,r,t}^{s} \mathbf{n}_{s} = \begin{pmatrix} E_{i,r,t}^{p} \\ E_{i,r,t}^{s} \end{pmatrix}, \qquad (2)$$

где индексы *i,r,t* обозначают падающую, отраженную и прошедшую волны, соответственно, а  $\mathbf{n}_p$  и  $\mathbf{n}_s$  – орты *p*- и *s*-поляризации.

Решение задачи представим в виде

$$\mathbf{E}_r = \hat{R}\mathbf{E}_i, \qquad \mathbf{E}_t = \hat{T}\mathbf{E}_i, \tag{3}$$

где  $\hat{R}$  и  $\hat{T}$  - 2x2 матрицы Джонса данной системы.

Численные расчеты будем проводить по следующей схеме. Сначала вычислим матрицы отражения и пропускания для слоя среды с толщиной, равной длине ультразвуковой волны. Для этого слой с толщиной  $d = \Lambda$  разобьем на большое число тонких слоев с толщиной  $d_i$ ,  $d_i$ ,  $d_{i,1},..., d_N$ . Если их максимальная толщина достаточно мала, то можно считать, что параметры среды постоянны в каждом слое. Тогда, согласно, в частности, [21], задача определения  $\hat{R}$  и  $\hat{T}$  для слоя с d = (сводится к решению следующей системы разностных матричных уравнений:

$$\hat{R}_{j} = \hat{r}_{j} + \tilde{\hat{t}}_{j} \hat{R}_{j-1} \left( \hat{I} - \tilde{\hat{r}}_{j} \hat{R}_{j-1} \right)^{-1} \hat{t}_{j},$$

$$\hat{T}_{j} = \hat{T}_{j-1} \left( \hat{I} - \tilde{\hat{r}}_{j} \hat{R}_{j-1} \right)^{-1} \hat{t}_{j},$$
(4)

с  $\hat{R}_0 = \hat{0}$ ,  $\hat{T}_0 = \hat{I}$ . Здесь  $\hat{R}_j$ ,  $\hat{T}_j$ ,  $\hat{R}_{j-1}$ ,  $\hat{T}_{j-1}$  - матрицы Джонса для сред с *j* и *j*-1 слоями, соответственно,  $\hat{r}_j$ ,  $\hat{t}_j$  - матрицы Джонса *j*-ого слоя,  $\hat{0}$  - нулевая матрица,  $\hat{I}$  - единичная

матрица, тильдой обозначены соответствующие матрицы Джонса в случае обратного направления распространения света. Например, в случае, когда слой среды с обеих сторон граничит с одной и той же средой, матрицы Джонса при падении света "справа" и "слева" связаны между собой соотношениями

$$\widetilde{\hat{T}} = \hat{F}^{-1}\hat{T}\hat{F}, \quad \widetilde{\hat{R}} = \hat{F}^{-1}\hat{R}\hat{F}, \tag{5}$$

где  $\hat{F} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$  при круговых базисных поляризациях и  $\hat{F} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$  при ли-

нейных базисных поляризациях.

Таким образом, задача сводится к вычислению матриц Джонса гиротропного слоя. Аналитическое решение этой задачи хорошо известно [22].

Для вычисления матриц отражения и пропускания всей системы мы снова используем систему разностных матричных уравнений (4), однако в этом случае уже  $\hat{r}_j, \hat{t}_j$  (матрицы Джонса для слоя с толщиной d = (. При

помощи (2)-(4) можно вычислить отражение  $R = \frac{|E_r|^2}{|E_i|^2}$  и пропускание  $T = \frac{|E_t|^2}{|E_i|^2}$ , поворот

плоскости поляризации  $\psi = \frac{1}{2} \operatorname{arctg} \left[ \frac{2 \operatorname{Re}(\chi_t)}{1 - |\chi_t|^2} \right]$  и эллиптичность поляризации

 $e = \frac{1}{2} \arcsin\left[\frac{2 \operatorname{Im}(\chi_t)}{1 + |\chi_t|^2}\right] (\chi_t = \frac{E_t^p}{E_t^s}), \text{ круговой и линейный дихроизмы и т.д.}$ 

Перейдем теперь к СП и собственным значениям амплитуд. Обозначив через  $\chi_i$  отношение комплексных компонент поля на входе системы ( $\chi_i = E_i^p / E_i^s$ ), а через  $\chi_t$  - то же отношение на выходе системы ( $\chi_t = E_t^p / E_t^s$ ), из (2) получаем связь между ними, имеющую вид

$$\chi_t = (T_{22}\chi_i + T_{21})/(T_{12}\chi_i + T_{11}).$$
(6)

Функция  $\chi_t = f(\chi_i)$  называется поляризационной передаточной функцией [20] и несет информацию о преобразовании эллипса поляризации при прохождении света через систему. Каждая оптическая система имеет две СП, получаемые подстановкой  $\chi_i = \chi_t$ . Согласно (5) для СП  $\chi_1$  и  $\chi_2$  получаем

$$\chi_{1,2} = \frac{T_{22} - T_{11} \pm \sqrt{(T_{22} - T_{11})^2 + 4T_{12}T_{21}}}{2T_{12}} \,. \tag{7}$$

Функция

$$F(\chi_i) = \sqrt{\frac{\left(\left|T_{12}\chi_i + T_{11}\right|^2 + \left|T_{22}\chi_i + T_{21}\right|^2\right)}{\left(1 + \left|\chi_i\right|^2\right)}} \frac{\left(T_{12}\chi_i + T_{11}\right)}{\left|T_{12}\chi_i + T_{11}\right|},$$
(8)

называемая передаточной функцией для комплексной амплитуды, несет информацию о

преобразовании комплексной амплитуды волны при ее прохождении через оптическую систему [20]. Связанные с СП собственные значения передаточной функции для комплексной амплитуды  $V_1 = F(\chi_1)$  и  $V_2 = F(\chi_2)$  определяют амплитудные коэффициенты пропускания при падении на систему света с поляризациями  $\chi_i = \chi_1$  и  $\chi_i = \chi_2$ , соответственно.

Аналогичным образом функция

$$G(\chi_i) = \sqrt{\frac{\left(\left|R_{12}\chi_i + R_{11}\right|^2 + \left|R_{22}\chi_i + R_{21}\right|^2\right)}{\left(1 + \left|\chi_i\right|^2\right)}} \frac{\left(R_{12}\chi_i + R_{11}\right)}{\left|R_{12}\chi_i + R_{11}\right|},$$
(9)

называется передаточной функцией для комплексной амплитуды отраженной волны. Связанные с СП собственные значения передаточной функции для комплексной амплитуды отраженной волны  $W_1=G'_1(i)$  и  $W_2=G'_1(i)$  определяют амплитудные коэффициенты отражения при падении на систему света с поляризациями  $\chi_i = \chi_1$  и  $\chi_i = \chi_2$ , соответственно. Ниже представлены результаты численного анализа по исследованию особенностей СП и собственных значений для слоя гиротропного кристалла, находящегося в ультразвуковом поле.

#### 3. Результаты. Обсуждение

Численное исследование особенностей СП и собственных значений для слоя гиротропного кристалла, находящегося в ультразвуковом поле, показывает, что при отсутствии диэлектрических границ (при  $\varepsilon_m = \varepsilon, \varepsilon_m$  – средняя диэлектрическая проницаемость рассматриваемой среды, а  $\varepsilon$  - диэлектрическая проницаемость среды, ограничивающей с обеих сторон рассматриваемый слой) в случае нормального падения СП ортогональны ( $\chi_1 \chi_2^* = -1$ ) и представляют собой ортогональные круговые поляризации.

При наклонном падении СП для слоя гиротропного кристалла, находящегося в ультразвуковом поле, перестают быть ортогональными, как это имеет место при наличии поглощения или при наличии диэлектрических границ (т.е. при  $\varepsilon_m \neq \varepsilon$ ). На рис.1 представлены зависимости эллиптичности

$$e_{1} = \frac{1}{2} \arcsin\left[\frac{2 \operatorname{Im}(\chi_{1})}{1 + |\chi_{1}|^{2}}\right]$$
(кр.1) и азимута  $\psi_{1} = \frac{1}{2} \operatorname{arctg}\left[\frac{2 \operatorname{Re}(\chi_{1})}{1 - |\chi_{1}|^{2}}\right]$ (кр.2) первой СП от

длины волны при различных углах падения падающей волны. Эллиптичность

$$e_2 = \frac{1}{2} \arcsin\left[\frac{2 \operatorname{Im}(\chi_2)}{1 + |\chi_2|^2}\right]$$
и азимут  $\psi_2 = \frac{1}{2} \operatorname{arctg}\left[\frac{2 \operatorname{Re}(\chi_2)}{1 - |\chi_2|^2}\right]$  второй СП по модулю

мало отличаются от  $e_1$  и  $\psi_1$ . Как видно из рисунков и как показывают вычисления, при наклонном падении СП представляют собой эллитические поляризации. В области дифракционного отражения (ОДО) эллиптичность СП по модулю значительно уменьшается, претерпевая значительные изменения в пределах области дифракционного отражения. Заметим, что аналогичные закономерности наблюдаются и у структурно хиральных ФК. При больших углах падения в длинноволновой части спектра наблюдается также изменение знака
эллиптичности СП. Такое свойство отсутствует у структурно хиральных ФК. Вне ОДО имеются области, где дифракционное отражение отсутствует, однако имеются резонансные изменения эллиптичности и азимута СП. С увеличением угла падения увеличивается число таких областей.



Рис.1. Зависимость эллиптичности  $e_1$  (кр.1) и азимута  $\psi_1$  (кр.2) первой СП от длины волны при различных углах падения света. Параметры задачи таковы:  $\varepsilon$  =2.5,  $\mu$  =1, y =0,05,  $\Delta \varepsilon$  =0.5,  $\Delta \mu$  = 0.0005,  $\Delta y$ = 0.00001,  $\Lambda$  = 0.4 мкм, d/ =50.

На рис.2а,b,c,d представлена зависимость коэффициента отражения R от длины волны  $\lambda$  при падении на слой ХЖК света с поляризациями  $\chi_i = \chi_{1,2}$ , т.е. зависимость  $R_{1,2} = |G(\chi_{1,2})/E_i|^2$  (кр.1 и 2, соответственно) от длины волны при различных углах (указанных на рисунках) падения света. Сравнение этих графиков с аналогичными графиками при падении на среду света с правой и левой круговыми поляризациями [19], показывает, что если для СП кривые дифракционного отражения имеют хорошо известный вид «столбиков», то для остальных поляризаций соответствующие кривые асимметричны, что является проявлением частотной зависимости СП в пределах области дифракционного отражения. При больших углах падения с значительной интенсивностью возбуждается и дифракционное отражение в высших порядках. Однако, ширина областей дифракционного отражения высших порядков намного меньше. При наклонном падении возникает трехпичковая дифракционная область с центральной областью полного отражения и боковыми областями селективного отражения. В зависимости от угла падения, параметров среды и порядка дифракции эти области или граничат друг с другом, или они могут быть также разделены. С увеличением угла падения область дифракционного отражения сторону

коротких волн, при этом увеличивается и частотная ширина этих областей.



Рис.2. Зависимость  $R_{1,2} = |G(\chi_{1,2})/E_i|^2$  (кр.1 и 2, соответственно) от длины волны при различных углах падения света. Параметры те же, что и на рис.1.

Сравнение этих результатов с аналогичными результатами для структурно хиральных ФК показывает, что если в хиральных ФК фотонная запрещенная зона существует только для света с одной круговой поляризацией (при нормальном падении света), то для гиротропного кристалла, находящегося в ультразвуковом поле, обе круговые поляризации дифракционные. Это свойство хирального ФК при определенных практических применениях является их важным преимуществом. Однако, то же свойство при других обстоятельствах является важным недостатком хиральных ФК. Поэтому указанные особенности гиротропного кристалла, находящегося в ультразвуковом поле, могут найти определенное применение.

На рис.3 представлена зависимость коэффициента отражения R от угла падения для различных длин волн падающего света при падении на среду света с поляризациями  $\chi_i = \chi_{1,2}$ .



Рис.3. Зависимость  $R_{1,2} = |G(\chi_{1,2})/E_i|^2$  (кр.1 и 2, соответственно) от угла падения при различных длинах волн света. Параметры те же, что и на рис.1.



Рис.4. Зависимость эллиптичности *е*<sub>1</sub> первой СП от угла падения при различных длинах волн света. Параметры те же, что и на рис.1.

На рис.4 показана зависимость эллиптичности *e*<sup>1</sup> от угла падения для различных длин волн падающего света. Как видно из рисунка, в длинноволновой области спектра *e*<sup>1</sup> при больших углах падения меняет знак. С увеличением длины волны увеличивается то значение угла падения, при котором происходит изменение знака эллиптичности СП.

#### 4. Заключение

В данной работе нами исследованы особенности СП и собственных значений для слоя гиротропной среды, находящейся в ультразвуковом поле. Нами обнаружено изменение знака эллиптичности СП при больших углах падения, а также сильные изменения эллиптичности СП в областях образования дифракционного отражения.

Отметим, что из-за изменения СП изменяется также характер дифракционного отражения излучения в среде. Так как ширина областей дифракционного отражения, их частотное местоположение и частотное расстояние определяются параметрами задачи, то ими можно управлять. Следовательно, такие системы можно использовать как управляемые поляризационные фильтры и зеркала, преобразователи поляризации мод, модовые дискриминаторы, мультиплексеры для циркулярно поляризованных волн, они могут быть использованы как источники круговой (эллиптической) поляризации.

## ЛИТЕРАТУРА

- 1. J.Joannopoulos, R.Meade, J.Winn. Photonic Crystals. Prinston, Prinston Univ., 1995.
- 2. K.Sakoda. Optical Properties of Photonic Crystals. Berlin, Springer, 2001.
- 3. A.Yariv, P.Yeh. Optical Waves in Crystals. New York, Wiley, 1984.
- 4. P.Yeh. Optical Waves in Layered Media. New York, Wiley, 1988.
- 5. В.И.Балакший, В.Н.Парыгин, Л.Е.Чирков. Физические основы акустооптики. М., Радио и связь, 1985.
- 6. N.S.Kharusi, G.W.Farnell. Can. J. Phys., 47, 2719 (1969).
- 7. A.W.Werner, D.L.White, W.A.Bonner. J. Appl. Phys., 43, 4489 (1972).
- 8. В.Н.Белый, С.Н.Курилкин. Опт. и спектр., 76, 1027 (1994).
- 9. Г.В.Кулак. Опт. и спектр., 98, 947 (2005).
- 10. А.М.Дьяконов, Ю.В.Илисаский, Э.З.Яхкинд. Ж<br/>Т $\Phi,$  51, 1434 (1981).
- 11. D.L.Jaggard, N.Engheta, et al. IEEE Trans. Antennas Propag., 37, 1447 (1989).
- 12. A. Lakhtakia, V.V.Varadan, V.K.Varadan. Int. J. Eng. Sci., 27, 1267 (1989).
- 13. K.M.Flood, D.L.Jaggard. IEEE J. Quantum Electron., 30, 339 (1994).
- 14. A.Lakhtakia, V.V.Varadan, V.K.Varadan. J. Opt. Soc. Am. A, 6, 1675 (1989); erratum, 7, 951 (1990).
- 15. О.В.Иванов, Д.И.Семенцов. Кристаллография, 45, 534 (2000).
- 16. D.L.Jaggard, X.Sun. J. Opt. Soc. Am. A, 9, 804 (1992).
- 17. А.Ф.Константинова, Б.В.Набатов и др. Кристаллография, 47, 879 (2002).
- 18. K.M.Flood, D.L.Jaggard. J. Opt. Soc. Am. A, 13, 1395 (1996).
- 19. Э.М.Арутюнян, А.А.Геворгян. Изв. НАН Армении, Физика, 41, 37 (2006).
- 20. R.M.A.Azzam, N.M. Bashara. Ellipsometry and polarized light. Amsterdam, North-Holland, 1977.
- 21. А.А.Геворгян, К.В.Папоян, О.В.Пикичян. Опт. и спектр., 88, 586 (2000).
- 22. А.А.Геворгян. Опт. и спектр., **91**, 830 (2001).

## ԳԵՐՁԱՅՆԱՅԻՆ ԴԱՇՏՈՒՄ ԳՏՆՎՈՂ ԳԻՐՈՏՐՈՊ ԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐԻ ՕՊՏԻԿԱԿԱՆ ՀԱՏԿՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԸ։ II. ՍԵՓԱԿԱՆ ԲԵՎԵՌԱՑՈՒՄՆԵՐ ԵՎ ՍԵՓԱԿԱՆ ԱՐԺԵՔՆԵՐ

## Է.Մ. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Ս.Հ. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Ա.Հ. ԳԵՎՈՐԳՅԱՆ

Քննարկված է ուլտրաձայնի դաշտում գտնվող գիրոտրոպ բյուրեղով լույսի թեք անցումը։ Խնդիրը լուծված է շերտերի գումարման Համբարձումյանի մեթոդով։ Բերված են դաշտի սեփական բնեռացումների և կոմպլեքս լայնույթի համար փոխանցման ֆունկցիայի սեփական արժեքների առանձնահատկությունների հետազոտության արդյունքները։ Յույց է տրված, որ սպեկտրի որոշակի տիրույթում լույսի անկման անկյան մեծ արժեքների դեպքում դիտվում է սեփական բնեռացման էլիպսականության նշանի փոփոխություն։

## OPTICAL PROPERTIES OF GYROTROPIC CRYSTALS IN AN ULTRASOUND FIELD. II. NATURAL POLARIZATIONS AND EIGENVALUES

## E.M. HARUTYUNYAN, S.H. HARUTYUNYAN, A.H. GEVORGYAN

The light oblique transmission through a gyrotropic crystal layer being in an ultrasonic field is considered. The problem is solved by the Ambartsumian layer addition method. The specific properties of the natural polarizations and eigenvalues of the transfer function for the complex amplitude are considered. The change of sign of the ellipticity of natural polarizations at large values of the incidence angle is revealed.

УДК 548.0

# ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГИРОТРОПНЫХ КРИСТАЛЛОВ В УЛЬТРАЗВУКОВОМ ПОЛЕ. II. СОБСТВЕННЫЕ ПОЛЯРИЗАЦИИ И СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ

### Э.М. АРУТЮНЯН<sup>1</sup>, С.О. АРУТЮНЯН<sup>1</sup>, А.А. ГЕВОРГЯН<sup>2</sup>

#### <sup>1</sup>Институт прикладных проблем физики НАН Армении

<sup>2</sup>Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 24 мая 2006 г.)

Рассмотрено наклонное распространение света через слой гиротропного кристалла, находящегося в ультразвуковом поле. Задача решена методом сложения слоев Амбарцумяна. Приведены результаты изучения особенностей собственных поляризаций (СП) и собственных значений передаточной функции для комплексной амплитуды. Обнаружено изменение знака эллиптичности СП при больших углах падения.

#### 1. Введение

В последнее время большой интерес вызывают фотонные кристаллы (ФК) [1,2] ( особый класс искусственных структур с периодическим изменением диэлектрических свойств на пространственном масштабе порядка оптической длины волны. Такие структуры широко используются в современной интегральной оптике и оптоэлектронике, в лазерной и рентгеновской технике, в технике миллиметрового и субмиллиметрового диапазона длин волн, в антенной технике, в оптической связи. Важнейшим свойством ФК является зонная структура их спектра, аналогичная энергетической зонной структуре электронов в полупроводниках. Особый интерес представляют самоорганизующиеся структурнохиральные ФК (холестерические жидкие кристаллы, хиральные смектические жидкие кристаллы) и искусственно-созданные (методом вакуумного напыления) хиральносконструированные тонкослойные структуры (из-за более богатых оптических свойств. Для этих кристаллов фотонная запрещенная зона существует только для света с одной круговой поляризацией (при нормальном падении света), совпадающей со знаком хиральности среды. Здесь селективное по отношению поляризации дифракционное отражение наблюдается в спектральной области от  $\lambda_1 = \sigma n_0$  до  $\lambda_2 = \sigma n_e$ , где  $\sigma$  - шаг спирали,  $n_0 = \sqrt{\varepsilon_{II}}$  и  $n_e = \sqrt{\varepsilon_{II}}$  локальные коэффициенты преломления для обыкновенного и необыкновенного лучей, соответственно. Однако периодическое изменение параметров хиральной среды можно осуществлять также внешним ультразвуковым полем. Взаимодействие световых и ультразвуковых волн в кристаллах находит широкое применение для управления

параметрами световых пучков и исследования физических свойств вещества [3-10]. В настоящее время для изготовления акустооптических устройств обработки информации (модуляторов, дефлекторов, фильтров, процессоров, датчиков и т.д.) широкое применение находят кристаллы, обладающие как хорошими фотоупругими свойствами, так и гиротропией. К таким кристаллам в первую очередь относятся парателлурит (TeO<sub>2</sub>), теллур (Te), кварц ((-SiO<sub>2</sub>) и др. В последние годы интерес к исследованиям распространения электромагнитной волны в периодических хиральных средах значительно возрос. В работах [11-13] исследованы особенности распространения электромагнитной волны через периодическую хиральную среду при нормальном падении. В [14] рассмотрено отражение света от границы структуры периодически возмущенная нехиральная среда – хиральная среда. В работах [15,16] развит 4х4 матричный метод для хиральных многослойников. В [17] применен метод 4х4 Δ-матрицы Берремана. В [18] исследованы особенности структуры фотонных запрещенных зон в хиральных многослойных структурах.

В работе [19] для решения аналогичной задачи применен модифицированный метод сложения слоев Амбарцумяна, решена граничная задача для конечного слоя гиротропного кристалла, находящегося в ультразвуковом поле, изучены его дифракционные свойства, а также отмечена возможность применения этих систем в качестве поляризационных фильтров и зеркал.

В данной работе мы продолжим исследования, начатые в [19], и представим результаты исследования особенностей СП и собственных значений для конечного слоя гиротропного кристалла, находящегося в ультразвуковом поле.

Как известно, СП – это две поляризации, которые не изменяются при прохождении света через систему, а собственные значения – это значения передаточной функции для комплексной амплитуды, соответствующие СП [20]. СП и собственные значения дают много информации об особенностях взаимодействия света с системой и поэтому в оптике и особенно в эллипсометрии важное значение имеет вычисление СП и собственных значений для каждой оптической системы. Из определения СП следует, что они должны быть связаны с поляризациями внутренних волн (собственных мод), возбуждаемых в среде. Как показывают наши исследования, СП практически совпадают с поляризациями собственных мод. Однако, в общем случае существуют и определенные отличия: существуют только две СП, тогда как число собственных мод может быть больше двух, причем поляризации всех этих мод могут отличаться друг от друга (например, для невзаимных сред). В СП учтены влияния диэлектрических границ. Из сказанного следует, что исследование особенностей СП особенно важно в случае неоднородных сред, для которых неизвестно точное решение задачи.

В данной работе представлены результаты детального анализа особенностей СП и собственных значений при наклонном падении для гиротропного кристалла, находящегося в ультразвуковом поле.

#### 2. Теория

Рассмотрим отражение и пропускание света через конечный слой гиротропного кристалла, находящегося в ультразвуковом поле. Пусть слой среды занимает пространство между плоскостями z = 0 и z = d (d – толщина слоя). Плоская ультразвуковая волна распространяется вдоль оси z. Она превращает параметры  $\varepsilon$ ,  $\mu$  и  $\overline{\gamma}$  в функции от координаты z ( $\varepsilon$ ,  $\mu$  – диэлектрическая и магнитная проницаемости,  $\overline{\gamma}$  – параметр естественной гиротропии этого слоя) [19]. Здесь мы будем предполагать следующие законы изменения этих параметров:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon(z) \\ \mu(z) \\ \overline{\gamma}(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon \\ \mu \\ \overline{\gamma} \end{pmatrix} \left[ 1 + \begin{pmatrix} \Delta \varepsilon \\ \Delta \mu \\ \Delta \overline{\gamma} \end{pmatrix} \sin(Kz) \right],$$
(1)

где глубины модуляции  $\Delta \varepsilon$ ,  $\Delta \mu$  и  $\Delta \overline{\gamma}$  предполагаются малыми по отношению к единице величинами,  $K = 2\pi / \Lambda$ ,  $\Lambda - длина ультразвуковой волны. Плоскость падения света совпадает с плоскостью ($ *x*,*z* $), а волна падает под углом <math>\alpha$  к нормали границы слоя, совпадающей с плоскостью (*x*,*z*). Разложим компоненты амплитуд электрических полей падающей, отраженной и прошедшей волн на проекции, параллельные (*p*-поляризация) и перпендикулярные (*s*-поляризация) плоскости падения:

$$\mathbf{E}_{i,r,t} = E_{i,r,t}^{p} \mathbf{n}_{p} + E_{i,r,t}^{s} \mathbf{n}_{s} = \begin{pmatrix} E_{i,r,t}^{p} \\ E_{i,r,t}^{s} \end{pmatrix}, \qquad (2)$$

где индексы *i,r,t* обозначают падающую, отраженную и прошедшую волны, соответственно, а  $\mathbf{n}_p$  и  $\mathbf{n}_s$  – орты *p*- и *s*-поляризации.

Решение задачи представим в виде

$$\mathbf{E}_r = \hat{R}\mathbf{E}_i, \qquad \mathbf{E}_t = \hat{T}\mathbf{E}_i, \tag{3}$$

где  $\hat{R}$  и  $\hat{T}$  - 2x2 матрицы Джонса данной системы.

Численные расчеты будем проводить по следующей схеме. Сначала вычислим матрицы отражения и пропускания для слоя среды с толщиной, равной длине ультразвуковой волны. Для этого слой с толщиной  $d = \Lambda$  разобьем на большое число тонких слоев с толщиной  $d_i$ ,  $d_i$ ,  $d_{i,1},..., d_N$ . Если их максимальная толщина достаточно мала, то можно считать, что параметры среды постоянны в каждом слое. Тогда, согласно, в частности, [21], задача определения  $\hat{R}$  и  $\hat{T}$  для слоя с d = (сводится к решению следующей системы разностных матричных уравнений:

$$\hat{R}_{j} = \hat{r}_{j} + \tilde{\hat{t}}_{j} \hat{R}_{j-1} \left( \hat{I} - \tilde{\hat{r}}_{j} \hat{R}_{j-1} \right)^{-1} \hat{t}_{j},$$

$$\hat{T}_{j} = \hat{T}_{j-1} \left( \hat{I} - \tilde{\hat{r}}_{j} \hat{R}_{j-1} \right)^{-1} \hat{t}_{j},$$
(4)

с  $\hat{R}_0 = \hat{0}$ ,  $\hat{T}_0 = \hat{I}$ . Здесь  $\hat{R}_j$ ,  $\hat{T}_j$ ,  $\hat{R}_{j-1}$ ,  $\hat{T}_{j-1}$  - матрицы Джонса для сред с *j* и *j*-1 слоями, соответственно,  $\hat{r}_j$ ,  $\hat{t}_j$  - матрицы Джонса *j*-ого слоя,  $\hat{0}$  - нулевая матрица,  $\hat{I}$  - единичная

матрица, тильдой обозначены соответствующие матрицы Джонса в случае обратного направления распространения света. Например, в случае, когда слой среды с обеих сторон граничит с одной и той же средой, матрицы Джонса при падении света "справа" и "слева" связаны между собой соотношениями

$$\widetilde{\hat{T}} = \hat{F}^{-1}\hat{T}\hat{F}, \quad \widetilde{\hat{R}} = \hat{F}^{-1}\hat{R}\hat{F}, \tag{5}$$

где  $\hat{F} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$  при круговых базисных поляризациях и  $\hat{F} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$  при ли-

нейных базисных поляризациях.

Таким образом, задача сводится к вычислению матриц Джонса гиротропного слоя. Аналитическое решение этой задачи хорошо известно [22].

Для вычисления матриц отражения и пропускания всей системы мы снова используем систему разностных матричных уравнений (4), однако в этом случае уже  $\hat{r}_j, \hat{t}_j$  (матрицы Джонса для слоя с толщиной d = (. При

помощи (2)-(4) можно вычислить отражение  $R = \frac{|E_r|^2}{|E_i|^2}$  и пропускание  $T = \frac{|E_t|^2}{|E_i|^2}$ , поворот

плоскости поляризации  $\psi = \frac{1}{2} \operatorname{arctg} \left[ \frac{2 \operatorname{Re}(\chi_t)}{1 - |\chi_t|^2} \right]$  и эллиптичность поляризации

 $e = \frac{1}{2} \arcsin\left[\frac{2 \operatorname{Im}(\chi_t)}{1 + |\chi_t|^2}\right] (\chi_t = \frac{E_t^p}{E_t^s}), \text{ круговой и линейный дихроизмы и т.д.}$ 

Перейдем теперь к СП и собственным значениям амплитуд. Обозначив через  $\chi_i$  отношение комплексных компонент поля на входе системы ( $\chi_i = E_i^p / E_i^s$ ), а через  $\chi_t$  - то же отношение на выходе системы ( $\chi_t = E_t^p / E_t^s$ ), из (2) получаем связь между ними, имеющую вид

$$\chi_t = (T_{22}\chi_i + T_{21})/(T_{12}\chi_i + T_{11}).$$
(6)

Функция  $\chi_t = f(\chi_i)$  называется поляризационной передаточной функцией [20] и несет информацию о преобразовании эллипса поляризации при прохождении света через систему. Каждая оптическая система имеет две СП, получаемые подстановкой  $\chi_i = \chi_t$ . Согласно (5) для СП  $\chi_1$  и  $\chi_2$  получаем

$$\chi_{1,2} = \frac{T_{22} - T_{11} \pm \sqrt{(T_{22} - T_{11})^2 + 4T_{12}T_{21}}}{2T_{12}} \,. \tag{7}$$

Функция

$$F(\chi_i) = \sqrt{\frac{\left(\left|T_{12}\chi_i + T_{11}\right|^2 + \left|T_{22}\chi_i + T_{21}\right|^2\right)}{\left(1 + \left|\chi_i\right|^2\right)}} \frac{\left(T_{12}\chi_i + T_{11}\right)}{\left|T_{12}\chi_i + T_{11}\right|},$$
(8)

называемая передаточной функцией для комплексной амплитуды, несет информацию о

преобразовании комплексной амплитуды волны при ее прохождении через оптическую систему [20]. Связанные с СП собственные значения передаточной функции для комплексной амплитуды  $V_1 = F(\chi_1)$  и  $V_2 = F(\chi_2)$  определяют амплитудные коэффициенты пропускания при падении на систему света с поляризациями  $\chi_i = \chi_1$  и  $\chi_i = \chi_2$ , соответственно.

Аналогичным образом функция

$$G(\chi_i) = \sqrt{\frac{\left(\left|R_{12}\chi_i + R_{11}\right|^2 + \left|R_{22}\chi_i + R_{21}\right|^2\right)}{\left(1 + \left|\chi_i\right|^2\right)}} \frac{\left(R_{12}\chi_i + R_{11}\right)}{\left|R_{12}\chi_i + R_{11}\right|},$$
(9)

называется передаточной функцией для комплексной амплитуды отраженной волны. Связанные с СП собственные значения передаточной функции для комплексной амплитуды отраженной волны  $W_1=G'_1(i)$  и  $W_2=G'_1(i)$  определяют амплитудные коэффициенты отражения при падении на систему света с поляризациями  $\chi_i = \chi_1$  и  $\chi_i = \chi_2$ , соответственно. Ниже представлены результаты численного анализа по исследованию особенностей СП и собственных значений для слоя гиротропного кристалла, находящегося в ультразвуковом поле.

#### 3. Результаты. Обсуждение

Численное исследование особенностей СП и собственных значений для слоя гиротропного кристалла, находящегося в ультразвуковом поле, показывает, что при отсутствии диэлектрических границ (при  $\varepsilon_m = \varepsilon, \varepsilon_m$  – средняя диэлектрическая проницаемость рассматриваемой среды, а  $\varepsilon$  - диэлектрическая проницаемость среды, ограничивающей с обеих сторон рассматриваемый слой) в случае нормального падения СП ортогональны ( $\chi_1 \chi_2^* = -1$ ) и представляют собой ортогональные круговые поляризации.

При наклонном падении СП для слоя гиротропного кристалла, находящегося в ультразвуковом поле, перестают быть ортогональными, как это имеет место при наличии поглощения или при наличии диэлектрических границ (т.е. при  $\varepsilon_m \neq \varepsilon$ ). На рис.1 представлены зависимости эллиптичности

$$e_{1} = \frac{1}{2} \arcsin\left[\frac{2 \operatorname{Im}(\chi_{1})}{1 + |\chi_{1}|^{2}}\right]$$
(кр.1) и азимута  $\psi_{1} = \frac{1}{2} \operatorname{arctg}\left[\frac{2 \operatorname{Re}(\chi_{1})}{1 - |\chi_{1}|^{2}}\right]$ (кр.2) первой СП от

длины волны при различных углах падения падающей волны. Эллиптичность

$$e_2 = \frac{1}{2} \arcsin\left[\frac{2 \operatorname{Im}(\chi_2)}{1 + |\chi_2|^2}\right]$$
и азимут  $\psi_2 = \frac{1}{2} \operatorname{arctg}\left[\frac{2 \operatorname{Re}(\chi_2)}{1 - |\chi_2|^2}\right]$  второй СП по модулю

мало отличаются от  $e_1$  и  $\psi_1$ . Как видно из рисунков и как показывают вычисления, при наклонном падении СП представляют собой эллитические поляризации. В области дифракционного отражения (ОДО) эллиптичность СП по модулю значительно уменьшается, претерпевая значительные изменения в пределах области дифракционного отражения. Заметим, что аналогичные закономерности наблюдаются и у структурно хиральных ФК. При больших углах падения в длинноволновой части спектра наблюдается также изменение знака

эллиптичности СП. Такое свойство отсутствует у структурно хиральных ФК. Вне ОДО имеются области, где дифракционное отражение отсутствует, однако имеются резонансные изменения эллиптичности и азимута СП. С увеличением угла падения увеличивается число таких областей.



Рис.1. Зависимость эллиптичности  $e_1$  (кр.1) и азимута  $\psi_1$  (кр.2) первой СП от длины волны при различных углах падения света. Параметры задачи таковы:  $\varepsilon$  =2.5,  $\mu$  =1, y =0,05,  $\Delta \varepsilon$  =0.5,  $\Delta \mu$  = 0.0005,  $\Delta y$ = 0.00001,  $\Lambda$  = 0.4 мкм, d/ =50.

На рис.2а,b,c,d представлена зависимость коэффициента отражения R от длины волны  $\lambda$  при падении на слой ХЖК света с поляризациями  $\chi_i = \chi_{1,2}$ , т.е. зависимость  $R_{1,2} = |G(\chi_{1,2})/E_i|^2$  (кр.1 и 2, соответственно) от длины волны при различных углах (указанных на рисунках) падения света. Сравнение этих графиков с аналогичными графиками при падении на среду света с правой и левой круговыми поляризациями [19], показывает, что если для СП кривые дифракционного отражения имеют хорошо известный вид «столбиков», то для остальных поляризаций соответствующие кривые асимметричны, что является проявлением частотной зависимости СП в пределах области дифракционного отражения. При больших углах падения с значительной интенсивностью возбуждается и дифракционное отражение в высших порядках. Однако, ширина областей дифракционного отражения высших порядков намного меньше. При наклонном падении возникает трехпичковая дифракционная область с центральной областью полного отражения и боковыми областями селективного отражения. В зависимости от угла падения, параметров среды и порядка дифракции эти области или граничат друг с другом, или они могут быть также разделены. С увеличением угла падения область дифракционного отражения сторону

коротких волн, при этом увеличивается и частотная ширина этих областей.



Рис.2. Зависимость  $R_{1,2} = |G(\chi_{1,2})/E_i|^2$  (кр.1 и 2, соответственно) от длины волны при различных углах падения света. Параметры те же, что и на рис.1.

Сравнение этих результатов с аналогичными результатами для структурно хиральных ФК показывает, что если в хиральных ФК фотонная запрещенная зона существует только для света с одной круговой поляризацией (при нормальном падении света), то для гиротропного кристалла, находящегося в ультразвуковом поле, обе круговые поляризации дифракционные. Это свойство хирального ФК при определенных практических применениях является их важным преимуществом. Однако, то же свойство при других обстоятельствах является важным недостатком хиральных ФК. Поэтому указанные особенности гиротропного кристалла, находящегося в ультразвуковом поле, могут найти определенное применение.

На рис.3 представлена зависимость коэффициента отражения R от угла падения для различных длин волн падающего света при падении на среду света с поляризациями  $\chi_i = \chi_{1,2}$ .



Рис.3. Зависимость  $R_{1,2} = |G(\chi_{1,2})/E_i|^2$  (кр.1 и 2, соответственно) от угла падения при различных длинах волн света. Параметры те же, что и на рис.1.



Рис.4. Зависимость эллиптичности *е*<sub>1</sub> первой СП от угла падения при различных длинах волн света. Параметры те же, что и на рис.1.

На рис.4 показана зависимость эллиптичности *e*<sup>1</sup> от угла падения для различных длин волн падающего света. Как видно из рисунка, в длинноволновой области спектра *e*<sup>1</sup> при больших углах падения меняет знак. С увеличением длины волны увеличивается то значение угла падения, при котором происходит изменение знака эллиптичности СП.

#### 4. Заключение

В данной работе нами исследованы особенности СП и собственных значений для слоя гиротропной среды, находящейся в ультразвуковом поле. Нами обнаружено изменение знака эллиптичности СП при больших углах падения, а также сильные изменения эллиптичности СП в областях образования дифракционного отражения.

Отметим, что из-за изменения СП изменяется также характер дифракционного отражения излучения в среде. Так как ширина областей дифракционного отражения, их частотное местоположение и частотное расстояние определяются параметрами задачи, то ими можно управлять. Следовательно, такие системы можно использовать как управляемые поляризационные фильтры и зеркала, преобразователи поляризации мод, модовые дискриминаторы, мультиплексеры для циркулярно поляризованных волн, они могут быть использованы как источники круговой (эллиптической) поляризации.

## ЛИТЕРАТУРА

- 1. J.Joannopoulos, R.Meade, J.Winn. Photonic Crystals. Prinston, Prinston Univ., 1995.
- 2. K.Sakoda. Optical Properties of Photonic Crystals. Berlin, Springer, 2001.
- 3. A.Yariv, P.Yeh. Optical Waves in Crystals. New York, Wiley, 1984.
- 4. P.Yeh. Optical Waves in Layered Media. New York, Wiley, 1988.
- 5. В.И.Балакший, В.Н.Парыгин, Л.Е.Чирков. Физические основы акустооптики. М., Радио и связь, 1985.
- 6. N.S.Kharusi, G.W.Farnell. Can. J. Phys., 47, 2719 (1969).
- 7. A.W.Werner, D.L.White, W.A.Bonner. J. Appl. Phys., 43, 4489 (1972).
- 8. В.Н.Белый, С.Н.Курилкин. Опт. и спектр., 76, 1027 (1994).
- 9. Г.В.Кулак. Опт. и спектр., 98, 947 (2005).
- 10. А.М.Дьяконов, Ю.В.Илисаский, Э.З.Яхкинд. Ж<br/>Т $\Phi,$  51, 1434 (1981).
- 11. D.L.Jaggard, N.Engheta, et al. IEEE Trans. Antennas Propag., 37, 1447 (1989).
- 12. A. Lakhtakia, V.V.Varadan, V.K.Varadan. Int. J. Eng. Sci., 27, 1267 (1989).
- 13. K.M.Flood, D.L.Jaggard. IEEE J. Quantum Electron., 30, 339 (1994).
- 14. A.Lakhtakia, V.V.Varadan, V.K.Varadan. J. Opt. Soc. Am. A, 6, 1675 (1989); erratum, 7, 951 (1990).
- 15. О.В.Иванов, Д.И.Семенцов. Кристаллография, 45, 534 (2000).
- 16. D.L.Jaggard, X.Sun. J. Opt. Soc. Am. A, 9, 804 (1992).
- 17. А.Ф.Константинова, Б.В.Набатов и др. Кристаллография, 47, 879 (2002).
- 18. K.M.Flood, D.L.Jaggard. J. Opt. Soc. Am. A, 13, 1395 (1996).
- 19. Э.М.Арутюнян, А.А.Геворгян. Изв. НАН Армении, Физика, 41, 37 (2006).
- 20. R.M.A.Azzam, N.M. Bashara. Ellipsometry and polarized light. Amsterdam, North-Holland, 1977.
- 21. А.А.Геворгян, К.В.Папоян, О.В.Пикичян. Опт. и спектр., 88, 586 (2000).
- 22. А.А.Геворгян. Опт. и спектр., **91**, 830 (2001).

## ԳԵՐՁԱՅՆԱՅԻՆ ԴԱՇՏՈՒՄ ԳՏՆՎՈՂ ԳԻՐՈՏՐՈՊ ԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐԻ ՕՊՏԻԿԱԿԱՆ ՀԱՏԿՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԸ։ II. ՍԵՓԱԿԱՆ ԲԵՎԵՌԱՑՈՒՄՆԵՐ ԵՎ ՍԵՓԱԿԱՆ ԱՐԺԵՔՆԵՐ

## Է.Մ. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Ս.Հ. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Ա.Հ. ԳԵՎՈՐԳՅԱՆ

Քննարկված է ուլտրաձայնի դաշտում գտնվող գիրոտրոպ բյուրեղով լույսի թեք անցումը։ Խնդիրը լուծված է շերտերի գումարման Համբարձումյանի մեթոդով։ Բերված են դաշտի սեփական բնեռացումների և կոմպլեքս լայնույթի համար փոխանցման ֆունկցիայի սեփական արժեքների առանձնահատկությունների հետազոտության արդյունքները։ Յույց է տրված, որ սպեկտրի որոշակի տիրույթում լույսի անկման անկյան մեծ արժեքների դեպքում դիտվում է սեփական բնեռացման էլիպսականության նշանի փոփոխություն։

## OPTICAL PROPERTIES OF GYROTROPIC CRYSTALS IN AN ULTRASOUND FIELD. II. NATURAL POLARIZATIONS AND EIGENVALUES

## E.M. HARUTYUNYAN, S.H. HARUTYUNYAN, A.H. GEVORGYAN

The light oblique transmission through a gyrotropic crystal layer being in an ultrasonic field is considered. The problem is solved by the Ambartsumian layer addition method. The specific properties of the natural polarizations and eigenvalues of the transfer function for the complex amplitude are considered. The change of sign of the ellipticity of natural polarizations at large values of the incidence angle is revealed.

УДК 621.315

# ПОДВИЖНОСТЬ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА С ЗАВИСЯЩЕЙ ОТ ПОЛОЖЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОЙ МАССОЙ В КВАНТОВОЙ ПЛЕНКЕ

## А.Х. МАНАСЕЛЯН, А.А. КИРАКОСЯН

#### Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 17 мая 2006 г.)

Исследовано рассеяние электронов на заряженных примесных центрах в квантовой пленке с параболическим ограничивающим потенциалом с учетом координатной зависимости эффективной массы электрона в пленке. Рассчитана подвижность для различных распределений примесных центров (однородное распределение в пленке, в области барьера и во всем пространстве). Показано, что учет координатной зависимости приводит к уменьшению подвижности.

#### 1. Введение

Низкоразмерные электронные системы, в которых реализуется квантовый режим поведения носителей заряда (H3), весьма чувствительны к изменениям их размеров, геометрической формы и состава [1,2]. Важной характеристикой таких систем является время жизни H3 при различных механизмах рассеяния.

Исследованию примесного рассеяния в двумерных системах посвящены работы [3,4], где показано, что вероятность рассеяния НЗ на примесях уменьшается с уменьшением ширины квантовой ямы, т.е. в таких системах возможно подавление рассеяния на заряженных примесях и получение бульших, чем для массивных образцов, значений подвижности НЗ. Как показали исследования примесного рассеяния в квантовых проволоках (см., например, [5-8]), размерное квантование в двух направлениях приводит к еще большему подавлению рассеяния, и подвижность НЗ становится на несколько порядков больше, чем в массивном образце и в квантовой пленке.

В последние годы предметом особо пристального внимания теоретиков и экспериментаторов стали размерно квантованные системы с параболическим ограничивающим потенциалом [1], создаваемые методом плавного изменения концентрации сплава в гетероструктуре [9]. В модели прямоугольной квантовой ямы НЗ в яме приписывается постоянная эффективная масса, однако в случае параболической ямы такой подход эквивалентен пренебрежению зависимостью эффективной массы от положения в яме, что *а priori* не очевидно и не обосновано. В работах [10-12] рассмотрены одномерные системы с зависящей от координаты эффективной массой НЗ. Исследованы граничные условия для огибающей волновой функции, когда эффективная масса электрона меняется скачком при переходе из одной среды в другую, а также рассмотрены точнорешаемые задачи, когда эффективная масса электрона и ограничивающий квантовую яму потенциал меняются по закону гиперболического тангенса.

Следует особо отметить работы [13-17], в которых изложен метод суперсимметрии в квантовой механике для частиц с зависящей от координаты эффективной массой. С помощью метода суперсимметрии для заданной зависимости массы можно найти виды потенциалов, для которых уравнение Шредингера имеет точные аналитические решения. Однако эти потенциалы не всегда имеют реальный физический смысл.

В данной работе рассмотрены электронные состояния в полупроводниковой квантовой пленке, где концентрация сплава и, следовательно, эффективная масса и ограничивающий потенциал меняются по квадратичному закону. С помощью приближенного метода, предложенного в [18], где получены энергетические уровни и волновые функции электрона для основного и нескольких возбужденных состояний, рассмотрено рассеяние электронов на заряженных примесных центрах для различных распределений примесных центров (однородное распределение в пленке, в области барьера и во всем пространстве). Рассчитана также подвижность электронов для рассмотренных распределений примесей.

#### 2. Электронные состояния

Рассмотрим квантовую яму  $Ga_{1-x_{max}}Al_{x_{max}}As/Ga_{1-x}Al_xAs/Ga_{1-x_{max}}Al_{x_{max}}As$  с параболическим ограничивающим потенциалом, в которой концентрация сплава x зависит от координаты z по квадратичному закону и меняется от нулевого значения в центре ямы до значения  $x_{max}$  на ее границе:

$$x(z) = x_{\max} 4z^2 / a^2$$
 при  $|z| \le a/2$  и  $x(z) = x_{\max}$  при  $|z| > a/2$ , (1)

где *а* – ширина квантовой ямы (КЯ). Эффективная масса электрона и его потенциальная энергия в области ямы и барьера даются выражениями

$$m(z) = \begin{cases} m_1(1 + \alpha z^2), & |z| \le a/2, \\ m_2, & |z| > a/2, \end{cases} \quad V(z) = \begin{cases} V_0 \frac{4z^2}{a^2}, & |z| \le a/2, \\ V_0, & |z| > a/2, \end{cases}$$
(2)

где  $m_1 = 0.067m_0$  и  $m_2 = (0.067 + 0.083x_{\max})m_0$  – эффективные массы электрона в GaAs и Ga<sub>1-x<sub>max</sub></sub>Al<sub>x<sub>max</sub></sub>As, соответственно,  $m_0$  – масса свободного электрона,  $V_0 = 1.247Q_e x_{\max}$  эВ – высота потенциального барьера,  $Q_e = 0.6$  – доля разрыва потенциальной энергии, приходящаяся на зону проводимости,  $\alpha = (83/67)4x_{\max}/a^2$ .

Представив решение уравнения Шредингера в виде

$$\Psi(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\left(k_x x + k_y y\right)} \varphi(z) , \qquad (3)$$

где  $k_x$  и  $k_y$  – проекции двумерного волнового вектора  $\mathbf{k}_{\perp}$ , S – площадь пленки, для функции  $\varphi(z)$  получим уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{m(z)}\frac{\partial\varphi}{\partial z}\right) + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m(z)}\varphi + V(z)\varphi = E\varphi.$$
(4)

Энергию движения электрона в плоскости пленки запишем в виде

$$\frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m(z)} = \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_{\perp}} + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2} \left(\frac{1}{m(z)} - \frac{1}{m_{\perp}}\right).$$
(5)

где единая для всей системы эффективная масса электрона  $m_{\perp}$  определяется из требования равенства нулю среднего значения возмущения (второго слагаемого в уравнении (5)) [19]. При пренебрежении возмущением в (4) и воспользовавшись приближением, предложенным в [18], для функции  $\varphi(z)$  получим:

$$\varphi(z) = C_1 \begin{cases} C_2 e^{k_b z}, & z < -a/2, \\ (1 + \alpha z^2)^{1/2} e^{-\frac{1}{2}Bz^2} F\left(\frac{1}{4} - \frac{A^2}{4B}, \frac{1}{2}, Bz^2\right), & |z| \le a/2, \\ C_2 e^{-k_b z}, & z > a/2, \end{cases}$$
(6)

где F(a,b,z) – вырожденная гипергеометрическая функция,  $k_b = \frac{\left[2m_2(V_0 - E_n)\right]^{1/2}}{\hbar}$ ,

$$\begin{split} A &= \left(\frac{2m_1E_n}{\hbar^2} + \alpha\right)^{1/2}, \quad B = \left(\frac{8m_1V_0}{\hbar^2\alpha^2} - \frac{2m_1E_n\alpha}{\hbar^2} + 4\alpha^2\right)^{1/2}, \\ C_1 &= \left\{\frac{C_2^2}{k_b}e^{-k_ba} + \int_{-a/2}^{a/2} \left(1 + \alpha z^2\right)e^{-Bz^2}F^2\left(\frac{1}{4} - \frac{A^2}{4B}, \frac{1}{2}, Bz^2\right)dz\right\}^{-1/2}, \\ C_2 &= e^{k_ba/2}\left(1 + \frac{\alpha a^2}{4}\right)^{1/2}e^{-Ba^2/8}F\left(\frac{1}{4} - \frac{A^2}{4B}, \frac{1}{2}, B\frac{a^2}{4}\right). \end{split}$$

Энергетические уровни  $E_n$  определим из условия непрерывности логарифмической производной волновой функции на границе z = a/2, а для эффективной массы  $m_{\perp}$  получим:

$$\frac{1}{m_{\perp}} = C_1^2 \left\{ \frac{1}{m_1} \int_{-a/2}^{a/2} e^{-Bz^2} F^2 \left( \frac{1}{4} - \frac{A^2}{4B}, \frac{1}{2}, Bz^2 \right) dz + \frac{1}{m_2} \frac{C_2^2}{k_b} e^{-k_b a} \right\} .$$
(7)

#### 3. Расчет подвижности

Рассмотрим рассеяние электрона на заряженном примесном центре. Энергия взаимодействия электрона с примесью

$$V(\rho, z) = -\frac{e^2}{\chi \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}},$$
(8)

где *p* – диэлектрическая постоянная среды, *z*<sub>i</sub> – аппликата примесного центра.

В условиях заполнения только первой подзоны размерного квантования для расчета темпа импульсной релаксации воспользуемся формулой [3]

$$\tau^{-1}(k_{\perp}) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{k_{\perp}'} \int dz_i N_i(z_i) \left| \left\langle \mathbf{1}, \mathbf{k}_{\perp}' \right| V(\rho, z) \left| \mathbf{1}, \mathbf{k}_{\perp} \right\rangle \right|^2 (1 - \cos\theta) \delta\left( E_{k_{\perp}'} - E_{k_{\perp}} \right), \tag{9}$$

где  $N_i(z_i)$  – плотность примесей в точке  $z_i$ ,  $\theta$  – угол рассеяния,  $E_{k_{\perp}} = \hbar^2 k_{\perp}^2 / 2m_{\perp}$ . Для расчета матричного элемента перехода из состояния  $|1, \mathbf{k}_{\perp} >$  в состояние  $|1, \mathbf{k}'_{\perp} >$  воспользуемся выражением для двумерного фурье-образа кулоновского потенциала (8):  $V(\mathbf{q}, z) = (2\pi e^2 / \chi q) \exp(-q | z - z_i |)$ , где  $\mathbf{q} = \mathbf{k}'_{\perp} - \mathbf{k}_{\perp}$  [19].

Расчет времени импульсной релаксации и подвижности электронов проведем для трех случаев распределения примесных центров в системе.

а) Примеси распределены однородно внутри пленки (background impurities):

$$N_i(z_i) = Sn_i$$
 при  $|z| \le a/2$  и  $N_i(z_i) = 0$  при  $|z| > a/2$ . (10)

После подстановки (10) в (9) для темпа импульсной релаксации получим:

$$\tau_{b}^{-1}(k_{\perp}) = \tau_{0}^{-1} \frac{C_{1}^{4} m_{\perp}}{k_{\perp}^{2} a_{B}^{2} m_{1}} \int_{0}^{2\pi} d\theta \int_{-a/2}^{a/2} \frac{dz_{i}}{a_{B}} \left\{ \frac{C_{2}^{2} e^{-(k_{b}+k_{\perp}\sin\theta/2)a}}{k_{b}+k_{\perp}\sin\theta/2} \operatorname{ch}\left(2k_{\perp} z_{i}\sin\theta/2\right) + \int_{-a/2}^{a/2} \left(1+\alpha z^{2}\right) e^{-Bz^{2}} F^{2}\left(\frac{1}{4}-\frac{A^{2}}{4B},\frac{1}{2},Bz^{2}\right) e^{-2k_{\perp}|z-z_{i}|\sin\theta/2} dz \right\}^{2},$$
(11)

где  $\tau_0^{-1} = 2\pi n_i a_B^3 E_R / \hbar$ ,  $a_B = \hbar^2 \chi / m_1 e^2$  – эффективный боровский радиус,  $E_R = e^2 / 2a_B \chi$  – эффективная ридберговская энергия.

b) Примеси распределены однородно в области барьера (remote impurities):

$$N_i(z_i) = 0$$
 при  $|z| \le a/2$  и  $N_i(z_i) = Sn_i$  при  $|z| > a/2$ . (12)

В этом случае для темпа импульсной релаксации получим:

$$\tau_{r}^{-1}(k_{\perp}) = \tau_{0}^{-1} \frac{C_{1}^{4} m_{\perp}}{k_{\perp}^{2} a_{B}^{2} m_{l}} \left[ \int_{0}^{2\pi} d\theta \int_{-\infty}^{-a/2} \frac{dz_{i}}{a_{B}} \left\{ C_{2}^{2} \int_{-\infty}^{-a/2} e^{2k_{b}z} e^{-2k_{\perp}|z-z_{i}|\sin\theta/2} dz + \int_{-\infty}^{a/2} \left(1+\alpha z^{2}\right) e^{-Bz^{2}} F^{2} \left( \frac{1}{4} - \frac{A^{2}}{4B}, \frac{1}{2}, Bz^{2} \right) e^{-2k_{\perp}|z-z_{i}|\sin\theta/2} dz + C_{2}^{2} \int_{a/2}^{\infty} e^{-2k_{b}z} e^{-2k_{\perp}|z-z_{i}|\sin\theta/2} dz \right]^{2} + \int_{0}^{2\pi} d\theta \int_{a/2}^{\infty} \frac{dz_{i}}{a_{B}} \left\{ C_{2}^{2} \int_{-\infty}^{-a/2} e^{2k_{b}z} e^{-2k_{\perp}|z-z_{i}|\sin\theta/2} dz + \int_{a/2}^{2\pi} \left(1+\alpha z^{2}\right) e^{-Bz^{2}} F^{2} \left(\frac{1}{4} - \frac{A^{2}}{4B}, \frac{1}{2}, Bz^{2}\right) e^{-2k_{\perp}|z-z_{i}|\sin\theta/2} dz + C_{2}^{2} \int_{a/2}^{\infty} e^{-2k_{b}z} e^{-2k_{\perp}|z-z_{i}|\sin\theta/2} dz + \int_{-a/2}^{a/2} \left(1+\alpha z^{2}\right) e^{-Bz^{2}} F^{2} \left(\frac{1}{4} - \frac{A^{2}}{4B}, \frac{1}{2}, Bz^{2}\right) e^{-2k_{\perp}|z-z_{i}|\sin\theta/2} dz + C_{2}^{2} \int_{a/2}^{\infty} e^{-2k_{b}z} e^{-2k_{\perp}|z-z_{i}|\sin\theta/2} dz \right\}^{2} \right].$$
(13)

с) Примеси распределены однородно во всем пространстве. В этом случае для темпа импульсной релаксации получим:

$$\tau^{-1}(k_{\perp}) = \tau_{0}^{-1} \frac{C_{1}^{4} m_{\perp}}{k_{\perp}^{2} a_{B}^{2} m_{1}} \int_{0}^{2\pi} d\theta \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz_{i}}{a_{B}} \left\{ C_{2}^{2} \int_{-\infty}^{-a/2} e^{2k_{b}z} e^{-2k_{\perp}|z-z_{i}|\sin\theta/2} dz + \int_{-a/2}^{a/2} (1+\alpha z^{2}) e^{-Bz^{2}} \times \right.$$

$$\times F^{2} \left( \frac{1}{4} - \frac{A^{2}}{4B}, \frac{1}{2}, Bz^{2} \right) e^{-2k_{\perp}|z-z_{i}|\sin\theta/2} dz + C_{2}^{2} \int_{a/2}^{\infty} e^{-2k_{b}z} e^{-2k_{\perp}|z-z_{i}|\sin\theta/2} dz \right\}^{2}.$$

$$(14)$$

Как известно, примесное рассеяние является основным механизмом рассеяния при низких температурах, когда фононным рассеянием можно пренебречь. При низких температурах, когда электронный газ вырожден, подвижность  $\mu = e\tau(k_F)/m_{\perp}$ , где фермиевское волновое число  $k_F = \sqrt{2\pi n_e}$ , а  $n_e$  – концентрация двумерного электронного газа в пленке. Заметим, что при  $n_e = 10^{11} \,\mathrm{cm}^{-2}$  условие вырожденности имеет место при T  $T_0 \sim 40 \,\mathrm{K}$ . Для того, чтобы рассеяние H3 имело место только в первой подзоне, необходимо, чтобы  $k_F \leq k_{\rm max} = \sqrt{2m_1(E_2 - E_1)/k^2}$ ,  $k_F \leq k_{\rm max} = \sqrt{2m_{\perp}(E_2 - E_1)/\hbar^2}$ , где  $E_1$  и  $E_2$  – дискретные энергии в направлении квантования. Для ямы с шириной  $a = 2a_B \approx 200 \,\mathrm{\AA}$   $k_{\rm max} \approx 3.3 \cdot 10^6 \,\mathrm{cm}^{-1}$ , следовательно, условие заполнения только первой подзоны выполняется для плотностей  $n_e \leq 1.5 \cdot 10^{12} \,\mathrm{cm}^{-2}$ .

## 4. Обсуждение результатов

Численные расчеты нами были проведены для квантовой ямы  $Ga_{0.7}Al_{0.3}As/Ga_{1-x}Al_xAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$  с использованием эффективной ридберговской энергии  $E_R = 5.2$  мэВ и эффективного боровского радиуса  $a_R = 104$ Å [9].

На рис.1 представлены зависимости электронных энергетических уровней от ширины КЯ (здесь и на последующих рисунках пунктирные линии соответствуют постоянной эффективной массе электрона в КЯ). Как видно из рис.1, учет зависимости эффективной массы от положения в КЯ приводит к смещению уровней в область низких энергий. При этом, чем выше энергетический уровень, тем больше величина этого смещения. Однако для

значений  $a \leq 0.22 a_B$  энергия основного состояния электрона с эффективной массой  $m_1$  опускается ниже энергии при учете координатной зависимости эффективной массы, что объясняется большим просачиванием электрона с меньшей эффективной массой в область барьера. При увеличении ширины КЯ влияние барьера уменьшается, и энергия электрона с зависящей от положения массой понижается. Так, для  $a = 1.5 a_B$  относительное изменение энергии для основного состояния составляет около 9% (абсолютное –  $0.79E_R$ ), для первого возбужденного состояния – 9.1% ( $2.35E_R$ ), а для второго возбужденного состояния – 8.7% ( $3.54E_R$ ).



Рис.1. Зависимость энергетических уровней от ширины КЯ.

На рис.2а приведена зависимость эффективной массы  $m_{\perp}$  от концентрации сплава  $x_{\max}$  для различных значений толщины пленки. С увеличением  $x_{\max}$  эффективная масса увеличивается из-за роста массы электрона как в пленке, так и в области барьера. При этом отличие зависимостей эффективной массы от  $x_{\max}$  для различных значений толщины пленки обусловлено зависимостью вероятности туннелирования электрона из пленки в область барьера и определяется зависимостью эффективной массы и ограничивающего потенциала от концентрации сплава.

На рис.2b представлена зависимость эффективной массы  $m_{\perp}$  от толщины пленки a. С увеличением a эффективная масса уменьшается, потому что электрон в основном находится в центральной части ямы, где масса наименьшая. Для фиксированного значения a учет зависимости массы от координаты приводит к увеличению массы  $m_{\perp}$ , поскольку эффективная масса электрона в яме увеличивается.



*х*<sub>max</sub> (а) и от толщины пленки (b).

На рис.З показана зависимость подвижности от толщины пленки в случае, когда примеси распределены внутри пленки. При уменьшении толщины пленки подвижность увеличивается из-за увеличения вероятности нахождения НЗ в области барьера, и вероятность рассеяния на примесных центрах, находящихся в области пленки, уменьшается. Учет зависимости эффективной массы электрона от координаты приводит к уменьшению подвижности вследствие увеличения массы частицы. Этот эффект хорошо заметен для значений толщины пленки  $0.3a_B \le a \le 1.5a_B$ .



Рис.3. Зависимость подвижности электронов от толщины пленки.

На рис.4 приведена зависимость подвижности НЗ от толщины пленки в случае, когда примеси распределены снаружи (кривая 1) и однородно во всем пространстве (кривая 2). Для малых значений *а* электроны рассеиваются только на внешних примесях и кривые совпадают. При увеличении толщины пленки в обоих случаях подвижность растет из-за увеличения роли размерного квантования. Однако в случае внешних примесей подвижность растет быстрее, а кривая находится выше, потому что с ростом толщины пленки электроны локализуются в области, где отсутствуют примеси.



Рис.4. Зависимость подвижности электронов от толщины пленки в случае внешних и однородных примесей.

Таким образом, в работе рассмотрена более реалистичная модель квантовой пленки с параболическим ограничивающим потенциалом, в которой эффективная масса электрона зависит от положения, учет которого приводит к смещению энергетических уровней в область низких энергий и к уменьшению подвижности.

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

### ЛИТЕРАТУРА

- 1. J.H.Davies. The physics of low-dimensional semiconductors. Cambridge University Press, NY, 1998.
- 2. **P.Harrison**. Quantum wells, wires, and dots. Theoretical and computational physics. John Wiley & Sons ltd, NY, 1999.
- 3. J.Lee, H.N.Spector, V.K.Arora. J. Appl. Phys., 54, 6995 (1983).
- 4. J.L.Thobel, L.Baudry, F.Dessenne, M.Charef, R.Fauquembergue. J. Appl. Phys., 73, 233 (1993).
- 5. H.Sakaki. Jpn. J. Appl. Phys., 19, L735 (1980).
- 6. J.W.Brown, H.N.Spector. J. Vacuum Sci. Technol. B, 4, 453 (1986).
- 7. G.Timp, R.E.Behringer, J.E.Chunningham. Phys. Rev. B, 42, 9259 (1990).
- 8. P.Vagner, M.Mosko. J. Appl. Phys., 81, 3196 (1997).
- 9. S.Adachi. J. Appl. Phys., 58, R1 (1985).
- 10. M.E.Pistol. Phys. Rev. B, 60, 14269 (1999).
- 11. L.Dekar, L.Chetouani, T.F.Hammann. J. Math. Phys., 39, 2551 (1998).
- 12. L.Dekar, L.Chetouani, T.F. Hammann. Phys. Rev. A, 59, 107 (1999).
- 13. R.Koc, M.Koca. J. Phys. A: Math. Gen., 36, 8105 (2003).
- 14. N.Moiseyev, R.Lefebvre. Phys. Rev. A, 64, 052711 (2001).
- 15. A.R.Plastino, A.Rigo, M. Casas, F.Garcias, A.Plastino. Phys. Rev. A, 60, 4318 (1999).

- 16. B.Gonul, D.Tutcu, O.Ozer. Mod. Phys. Lett. A, 17, 2057 (2002).
- 17. A. De Souza Dutra, M.Hott, C.A.S.Almeida. EuroPhys. Lett., 62, 8 (2003).
- 18. **А.Х.Манаселян**. Изв. НАН Армении, Физика, **39**, 384 (2004).
- 19. **G.Bastard**. Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures. Les editions de Physique. Les Ulis, Cedex, France, 1988.

## ԴԻՐՔԻՑ ԿԱԽՎԱԾ ԱՐԴՅՈՒՆԱՐԱՐ ԶԱՆԳՎԱԾՈՎ ԼԻՑՔԱԿԻՐՆԵՐԻ ՇԱՐԺՈՒՆՈՒԹՅՈՒՆԸ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԹԱՂԱՆԹՈՒՄ

#### Ա.Խ. ՄԱՆԱՍԵԼՅԱՆ, Ա.Ա. ԿԻՐԱԿՈՍՅԱՆ

Ուսումնասիրված է էլեկտրոնների ցրումը լիցքավորված խառնուրդային կենտրոնների վրա պարաբոլական սահմանափակող պոտենցիալով քվանտային թաղանթում, էլեկտրոնի արդյունարար զանգվածի կոորդինատային կախվածության հաշվառմամբ։ Հաշվարկված է էլեկտրոնի շարժունությունը խառնուրդային կենտրոնների տարբեր բաշխումների դեպքում (համասեռ բաշխում թաղանթում, արգելքի տիրույթում և ամբողջ տարածությունում)։ Ցույց է տրված, որ կոորդինատային կախվածության հաշվառումը բերում է շարժունության նվազման։

## MOBILITY OF CHARGE CARRIERS WITH POSITION-DEPENDENT EFFECTIVE MASS IN A QUANTUM FILM

## A.KH. MANASELYAN, A.A. KIRAKOSYAN

The scattering of electrons on charged impurity centers in a quantum film with the parabolic confining potential is investigated, taking into account the coordinate dependence of the electron effective mass in the film. The mobility is calculated for various distributions of impurity centers (homogeneous distribution in the film, barrier region and the whole space). It is shown that the consideration of the coordinate dependence leads to the mobility decrease.

УДК 532.783

# ВЛИЯНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ КОМПОНЕНТОВ НА ИНДУЦИРОВАНИЕ МЕЗОФАЗ В НЕМАТИЧЕСКИХ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

## Л.С. БЕЖАНОВА, З.В. БАГДАСАРЯН, М.Л. БАБУРЯН

Институт прикладных проблем физики НАН Армении

(Поступила в редакцию 3 мая 2006 г.)

С учетом особенностей молекулярной структуры компонентов исследованы диэлектрические свойства нематических жидкокристаллических (НЖК) систем в температурном интервале существования мезофаз. С помощью анализа спектров ЭПР, проведенного на основе теории спиновой релаксации, получены и исследованы зависимости параметра порядка и энергии активации вращения от температуры и состава ЖК системы, а также оценены значения локальной вязкости систем в рамках гидродинамической модели. Установлено появление индуцированной и возвратной мезофаз. Показано, что в НЖК системах с нецентросимметричными молекулами корреляция между энергией активации и термостабильностью должна быть обратной по сравнению с моделью Майера-Заупе.

Фазовые диаграммы бинарных систем нематических жидких кристаллов (НЖК) за счет многообразия фазовых реакций и образования областей расслаивания значительно усложняются. В реальных жидкокристаллических системах наблюдаются сильные межмолекулярные взаимодействия, что может приводить к отклонениям рассчитанных данных от экспериментальных и к появлению индуцированных и возвратных фаз. И хотя при рассмотрении термотропного фазового перехода требуется учет энергии, зависящей от ориентации, стерические факторы (силы отталкивания) играют преобладающую роль, поскольку они ответственны за упаковку и, следовательно, за межмолекулярные расстояния. Таким образом, структура жидких кристаллов определяется в основном стерическими факторами, ими же определяется и температура просветления. При классификации ЖК мезофаз мы располагаем достаточно подробными сведениями о геометрии таких систем в целом, однако, не имеем достоверных сведений о динамических свойствах этих систем. Вопросы молекулярной структуры и динамических свойств ЖК мезофаз связаны с общей проблемой: каким образом скорости молекулярных движений связаны со специфической структурой жидкокристаллической фазы.

Настоящая работа посвящена исследованию молекулярной подвижности, индуцирования смектической и возвратной нематической фаз, а также зависимости термостабильности мезофаз от молекулярной структуры и состава НЖК бинарной системы; исследованию диэлектрических характеристик вблизи фазовых переходов. Объектами исследования являются нематические жидкие кристаллы: 4-цианофенил-4'-гептилбензоат -C7H15-C6H4-COO-C6H4-CN [Kp-43°C-H-58°C-ИЖ] – {I}; 4-пентил-4'-цианобифенил -C5H11-C6H4-C6H4-CN [Kp-24°C-H-36°C-ИЖ] – {II}; гексилоксифенил-4'-бутилбензоат -C4H9-C6H4-COO-C6H4-OC6H13 [Kp-32°C-H-49°C-ИЖ] – {III} и их бинарные системы.

Диэлектрические измерения проводились с помощью устройства, действующего по принципу мостов Шеринга. Диэлектрическим измерениям подверглись планарно ориентированные в ячейках типа "сэндвич" ЖК образцы с толщиной слоя 10 мкм. Измерения проводились на низких частотах, при которых ориентационная поляризация меняется в такт с внешним полем.

ЭПР исследования проводились на спектрометре ЭПР "РЭ-1301", работающем на частоте 9 ГГц, с помощью спинового зонда 2,2,6,6-тетраметил-4-оксипиперидин-1-оксил (ТМОПО). Исследуемые системы получали смешиванием двух жидких кристаллов в изотропном состоянии. К смеси добавляли радикал ТМОПО в таком количестве, чтобы свести к минимуму уширение из-за диполь-дипольного взаимодействия (концентрация радикала составляла 10<sup>-4</sup> моль/л). Образцы помещались в резонатор в тонкостенных стеклянных ампулах с внешним диаметром 5 мм. Температура исследуемого образца измерялась с точностью 0,1°С.

Спектры ЭПР парамагнитного зонда ТМОПО в ЖК представляют собой три узкие, хорошо разрешенные линии сверхтонкой структуры, возникающие за счет взаимодействия неспаренного электрона с ядерным спином атома азота. Анализ этих спектров проведен на основе теории спиновой релаксации [1-3], согласно которой в области быстрого вращения ширины  $\Gamma_2^{-1}$  трех резонансных линий поглощения ( $m = 0,\pm 1$ ; где m – ядерное квантовое число) в наиболее общем виде определяются соотношением

$$\Gamma_{2^{-1}} = (A + B m + C m^2) \chi + \tau, \qquad (1)$$

где  $\chi$  не зависит от *m* и вводится для учета всех возможных вкладов, не связанных с рассматриваемым механизмом уширения и принимается равным  $\chi = (1/3)A$  [3],  $\tau$  – время корреляции вращения радикала, а параметры A,B,C зависят от величины магнитной анизотропии и скорости молекулярной переориентации в жидкости.

Для упрощения анализа спектров ЭПР предполагается, что тензор вращательной диффузии D является аксиально симметричным. Отметим, что координатная система (x, y, z)– неподвижная лабораторная система, ось z которой направлена по директору, а оси x, y – в перпендикулярной оси z плоскости. Причем,  $A_{xx} = A_{yy} = A_{\perp}$ ,  $A_{zz} = A_{\parallel}$ ,  $a_N$  – среднее значение константы сверхтонкого расщепления:  $a_N = 1/3(A_{x'x'} + A_{y'y'} + A_{z'z'})$ , где  $A_{x'x'} = 5,2$  Гс,  $A_{y'y'} = 5,2$  Гс,  $A_{y'y'} = 31$  Гс есть главные значения тензора константы сверхтонкого расщепления ТМОПО в координатной системе (x', y', z'), связанной с радикальным фрагментом: ось x' выбрана вдоль связи N–O, ось z' – вдоль направления 2 $p\pi$ -орбитали атома азота и ось y'перпендикулярна двум другим осям. А – константа сверхтонкого расщепления экспериментального спектра в случае, когда постоянное магнитное поле Н параллельно оси z,  $A_{\perp}$  константа сверхтонкого расщепления при **H**  $\perp z$ ;  $a'_{N} = 1/3(A_{\parallel} + 2A_{\perp})$  и вносится в качестве поправки в выражение для вычисления параметра порядка  $S = [(A_{\parallel} - A_{\perp})/(A_{z'z'} - A_{x'x'})] \cdot a_N / a_N$ .  $D_3$  – компонент вращательной диффузии вокруг оси *z*, а  $D_1$  – компонент вокруг осей x и y.  $D_1$  и  $D_3$  определяются с помощью соответствующих времен корреляции, которые можно вычислить из спектров ЭПР при помощи уравнения [3]

$$T_{2}^{-1} = m^{2} \frac{4\pi^{2}}{5} \xi^{2} \left\{ A_{0}^{2} \tau_{0} \left[ \frac{8}{3} - \left(1 + \omega_{a}^{2} \tau_{0}^{2}\right)^{-1} - \frac{1}{3} \left(1 + \omega_{0}^{2} \tau_{0}^{2}\right)^{-1} \right] + 2A_{2}^{2} \tau_{0} \times \left[ \frac{8}{3} - \left(1 + \omega_{a}^{2} \tau_{2}^{2}\right)^{-1} - \frac{1}{3} \left(1 + \omega_{0}^{2} \tau_{2}^{2}\right)^{-1} \right] \right\} + m \frac{\pi}{10} \omega_{0} \xi \left\{ g_{0} A_{0} \tau_{0} \left[ \frac{16}{3} + 4 \left(1 + \omega_{0}^{2} \tau_{0}^{2}\right)^{-1} \right] + 2g_{2} A_{2} \tau_{2} \times \left[ \frac{16}{3} + 4 \left(1 + \omega_{0}^{2} \tau_{2}^{2}\right)^{-1} \right] \right\} + I \left(I + 1\right) \frac{4\pi^{2}}{5} \xi^{2} \left\{ A_{0}^{2} \tau_{0} \left[ \left(1 + \omega_{a}^{2} \tau_{0}^{2}\right)^{-1} + \frac{7}{3} \left(1 + \omega_{0}^{2} \tau_{0}^{2}\right)^{-1} \right] + 2A_{2}^{2} \tau_{2} \left[ \left(1 + \omega_{a}^{2} \tau_{2}^{2}\right)^{-1} + \frac{7}{3} \left(1 + \omega_{0}^{2} \tau_{2}^{2}\right)^{-1} \right] \right\} + \frac{\omega_{0}^{2}}{80} \left\{ g_{0}^{2} \tau_{0} \times \left[ \frac{8}{3} + 2 \left(1 + \omega_{0}^{2} \tau_{0}^{2}\right)^{-1} \right] + 2g_{2}^{2} \tau_{2} \times \left[ \frac{8}{3} + 2 \left(1 + \omega_{0}^{2} \tau_{0}^{2}\right)^{-1} \right] \right\} + \chi,$$

где  $\xi = |\gamma_e| \gamma_N h/2\pi$ ,  $\omega_{\alpha} = a_N |\gamma_e|/2$ ,  $\tau_0^{-1} = 6D_1$ ,  $\tau_2^{-1} = 2D_1 + 4D_3$ ,  $\omega_0$  – резонансная частота ЭПР,  $\gamma_e, \gamma_N$  – гиромагнитные отношения для свободного электрона и ядра азота, I – спин ядра атома азота. Величины  $A_0, A_2, g_0, g_2$  определяются через компоненты тензоров  $\hat{A}$  и  $\hat{g}$  в системе координат, где эти тензоры диагональны. В частности,  $A_0 = (3/2)^{1/2} (A_{z'z'} - a_N), A_2 = (A_{x'x'} - A_{y'y'})/2$  [4].

Анализ ширины линии спектров ЭПР и расчеты времен корреляции  $\tau_i$  по В и С с помощью (3) показывают, что условие  $\tau_i = \tau_i$  (i = 0, 2) выполняется, когда зонд в среде ориентируется таким образом, что ось x' становится параллельной оси z лабораторной системы отсчета, а параметр анизотропии вращения  $Q = \tau_{\perp} / \tau_{\parallel}$  в исследуемых ЖК системах в области "быстрых вращений" ( $\omega_0^2 \tau_2^2 >> 1$ ,  $\omega_{\alpha}^2 \tau_2^2 << 1$ ) не зависит от температуры и равен  $Q = 2, 6 \pm 0, 3$ . Само значение Q свидетельствует о существенной роли межмолекулярного взаимодействия в определении симметрии вращения радикала, а постоянство параметра Q соответствует гидродинамической модели вращения. В случае, когда поле **H** направлено вдоль оси симметрии z, ширина компонент спектра будет определяться лишь вращением радикала с частотой  $\tau_{\perp}^{-1}$ . В рамках этой модели, с помощью выражения

$$\tau_{\perp} = \frac{4\pi\eta r^3}{3kT} , \qquad (3)$$

где r – эффективный радиус радикала, k – постоянная Больцмана, T – температура образца, нами оценены значения локальной вязкости  $\eta$  исследуемых ЖК систем, которые приведены в табл.1.

t(C	{III}/ <b>50%</b> {I}	{III}/20%{I}	{III}/50%{II}	{III}/20%{II}
	<i>η</i> , мПа∙с	<i>η</i> , мПа∙с	η, мПа∙с	<i>η</i> , мПа·с
35	12	11	16	13
39	10	28	14	11
44	5	2	9	6

Табл.1. Значения коэффициента вязкости ЖК систем при различных температурах.

Концентрационные зависимости локальной вязкости  $\eta$  свидетельствуют об изменении характера межмолекулярного взаимодействия, которое нами связывается с разрушением молекулярных ассоциатов индивидуальных компонентов и образованием новых смешанных ассоциатов, что может привести к индуцированию новых мезофаз. В исследуемых ЖК системах, кроме системы {III}/20%{I}, с понижением температуры значение  $\eta$ , как и следовало ожидать, возрастает. В ЖК системе {III}/20%{I} значение  $\eta$  при понижении температуры от 44°C до 39°C резко увеличивается от значения 2 мПа·с до 28 мПа·с. При дальнейшем понижении температуры до 35°C значение  $\eta$  резко уменьшается и принимает значение  $\eta = 11$  мПа·с. Как будет показано ниже, такое поведение  $\eta$  в области температур 44-35°C подтверждает образование смектической фазы в данной системе в области температур 37-41°C, а факт уменьшения  $\eta$  при температуре 35°C находится в полном согласии с поведением поперечной составляющей диэлектрической проницаемости  $\varepsilon_{\perp}$  и параметра порядка *S* в температурной области 35-37°C, в которой будет установлено образование возвратной нематической мезофазы.

Результаты расчета параметра порядка S в зависимости от температуры и состава системы приведены на рис.1. Во всех индивидуальных соединениях и их бинарных системах при фазовом переходе ЖК(ИЖ S скачкообразно уменьшается.

Поведение *S* в температурном интервале существования мезофазы во всех исследованных объектах, кроме бинарной системы {III}/20%{I}, схоже. Для системы {III}/20%{I} поведение *S* в температурном интервале 41-45 °C совпадает с поведением *S* в остальных системах. Однако, для данной системы, вблизи точки t = 41 °C, с понижением температуры значение *S* увеличивается и в определенном температурном интервале (41-37 °C) принимает характерные для смектической фазы значения. Из рис.1 видно также, что при дальнейшем понижении темпертуры, вблизи точки t = 37 °C, *S* в указанной системе уменьшается, принимая значения, соответствующие нематической фазе. Такое поведение параметра порядка указывает на индуцирование в ЖК системе {III}/20%{I} смектической и возвратной нематической мезофаз. Тот факт, что в ЖК системах {III}/30%{I} и {III}/50%{I} вышеописанного поведения *S* не наблюдается (рис.1), свидетельствует о том, что увеличение концентрации компонента {I} не приводит к индуцированию новой фазы. Факт исчезновения индуцированных фаз в НЖК системах при замене компонента {I] соединением {II}, по-видимому, можно связать с различием энергии взаимодействия молекул в димерах указанных соединений. Согласно [5], силы притяжения и отталкивания распределены вдоль молекулы и во взаимодействии между двумя молекулами участвует та часть распределенных сил, которая соответствует участкам молекул, находящихся в непосредственной близости друг от друга. Резонно предположить, что в НЖК системах {III}/{II} влияние соединения {III} на димеры компонента {II}, вызванное структурными особенностями молекул {III}, уменьшается, что приводит к невозможности индуцирования мезофаз в указанной системе.



Рис..1. Зависимость параметра порядка *S* от температуры в ЖК системах:  $1 - \{I\}, 2 - \{II\}, 3 - \{III\}, 4 - \{III\}/20\%\{I\}, 5 - \{III\}/30\%\{I\}, 6 - \{III\}/50\%\{I\}, 7 - \{III\}/20\%\{II\}, 8 - \{III\}/50\%\{II\}.$ 

Вышеописанное изменение  $\eta$  и параметра порядка *S*, вызванное индуцированием мезофаз и их исчезновением в зависимости от температуры и состава системы, подтверждается и экспериментальными результатами диэлектрических измерений (рис.2). Отметим некоторые особенности диэлектрических свойств {I}, {II} и {III}-ЖК различных химических классов. Наименьшее значение  $\varepsilon_{\perp}$  соответствует соединению {II}. Наличие мостиковой группировки СОО у {I} и {III}, которая вносит вклад как в параллельную, так и в перпендикулярную составляющие ориентационной поляризации, а также алкилокси-группы в конце молекулы {III}, приводит к относительному увеличению поперечного дипольного момента молекул, а значит и к относительному увеличению  $\varepsilon_{\perp}$  (рис.2).



а

Рис.2. Температурные зависимости диелектрической пронициаемости  $\mathcal{E}_{\perp}$  в ЖК системах: a) 1 – {II}, 2 – {III}, 3 – {I}; 6) 1 – {III}/20%{II}, 2 –{III}/25%{II}, 3 – {III}/30%{II}, 4 – {III}/50%{II}; в) 1 – {III}/20%{I}, 2 –{III}/25%{I}, 3 – {III}/30%{I}, 4 – {III}/50%{I}.

б

Таким образом, становится очевидным влияние молекулярной структуры исследуемых НЖК на значение поперечной составляющей диэлектрической проницаемости.

Влияние смектического порядка на температурной шкале также сказывается на диэлектрических свойствах системы {III}/{I} вследствие дипольной корреляции молекул, приводя к увеличению  $\mathcal{E}_{\perp}$  (рис.2). Из температурного хода  $\mathcal{E}_{\perp}$  для систем {III}/{II} следует также, что данные системы обладают одной единственной мезофазой – нематической. Что касается систем {III}/{I}, то, как было отмечено, при определенных концентрациях компонентов в них индуцируются смектическая и возвратная нематическая мезофазы. Заметим, что точка плавления указанных систем не зависит от концентрации компонентов. Однако, обратим внимание на то, что в отличие от точки плавления, точки просветления  $t_{np}$  с увеличением концентрации {II} в системах {III}/{II} продвигаются вперед, то есть повышается термостабильность мезофазы. Полученные результаты, обусловленные сложным характером межмолекулярного взаимодействия в НЖК системах, указывают на необходимость учета специфики взаимодействующих веществ разных химических классов.

Расчет энергии активации вращения  $E_a$  с помощью времен релаксации  $\tau_i$  для разных систем {III}/{I} показывает, что минимальное значение  $E_a = 6,6$  ккал/моль соответствует ЖК системе, когда {I} составляет 20 моль% смеси, а наибольшее  $E_a = 18,4$  ккал/моль – индивидуальному {III} (рис.3). Заметим что минимальная энергия активации вращательной диффузии наблюдается при таких соотношениях концентрации компонентов, при которых индуцирована смектическая фаза.



Рис.3. Концентрационная зависимость энергии активации  $E_a$  (1) и температуры просветления  $t_{np}$  (2) для {III}/{I} ЖК системы.

Полученные неаддитивные концентрационные зависимости  $t_{np}$  и  $E_a$  параметров бинарных систем НЖК (рис.3) свидетельствуют об изменении характера межмолекулярного взаимодействия по сравнению с исходными компонентами. Отметим, что уменьшение энергии активации  $E_a$  при одновременном увеличении температуры просветления (рис.1) не может быть объяснено в рамках теории среднего поля Майера–Заупе, поскольку, согласно теории, высота потенциального барьера, который необходимо преодолеть вращающейся частице, т.е. энергия активации  $E_a$  пропорциональна температуре просветления  $t_{np}$  и должна увеличиваться с увеличением  $t_{np}$  [6]. Однако экспериментально наблюдается обратная зависимость.

Если считать, что исходные компоненты центросимметричны, а их бинарные системы (c = 20-50%) нецентросимметричны из-за разрушения димеров {I} и {II} и образования ассоциатов из молекул цианопроизводного и матрицы {III} [7], тогда становится возможной интерпретация полученных результатов в рамках работы [8], в которой показано, что в нематиках с нецентросимметричными молекулами (или ассоциатами) корреляция между энергией активации и термостабильностью должна быть обратной по сравнению с моделью [6].

Поскольку для компонентов {I} и {II} характерно образование димеров [7], то в их системах {III}/{I} и {III}/{II} разной концентрации возможно существенно нелинейное изменение корреляционных факторов и образование перекрестных димеров, которое может привести к увеличению  $t_{np}$  и уменьшению  $E_a$ .

#### ЛИТЕРАТУРА

1. K.Matsuura, Y.Kotake, K.Kuwata. Mol. Cryst. Liq. Cryst., 140, 327 (1986).

- 2. Ч.Сликтер. Основы теории магнитного резонанса. М., Мир, 1981.
- 3. S.A.Goldman, G.V.Bruno, C.F.Polnaszek, J.H. Freed. J. Chem. Phys., 56, 716 (1972).
- 4. А.Н.Кузнецов. Метод спинового зонда (основы и применение). М., Наука, 1976.
- 5. S.M.Yayloyan, L.S.Bezhanova, A.M.Yayloyan. Mol. Cryst. Liq. Cryst., 365, 747 (2001).
- 6. A.C.Diogo, A.F.Martins. Mol. Cryst. Liq. Cryst., 66, 133 (1981).
- 7. А.Ц.Саркисян, Л.С.Бежанова. Ж. физ. хим., 63, 2504 (1989).

8. В.В.Беляев, А.А.Герасимов, М.Ф.Гребенкин, Л.Н.Лисецкий. ЖЭТФ, 29, 815 (1984).

## ՆԵՄԱՏԻԿ ՀԵՂՈՒԿ ԲՅՈՒՐԵՂԱԿԱՆ ՀԱՄԱԿԱՐԳԵՐՈՒՄ ՄԵԶՈՓՈՒԼԵՐԻ ՄԱԿԱԾՄԱՆ ՎՐԱ ԲԱՂԱԴՐԻՉՆԵՐԻ ՄՈԼԵԿՈՒԼԱՅԻՆ ԿԱՌՈՒՑՎԱԾՔԻ ԱԶԴԵՑՈՒԹՅՅՈՒՆԸ

### Լ.Ս. ԲԵԺԱՆՈՎԱ, Զ.Վ. ԲԱՂԴԱՍԱՐՅԱՆ, Մ.Լ. ԲԱԲՈՒՐՅԱՆ

Մեզոփուլերի գոյության ջերմաստիձանային ինտերվալում հետազոտված են նեմատիկ հեղուկ բյուրեղական (ՆՀԲ) համակարգերի դիէլեկտրական հատկությունները՝ հաշվի առնելով բաղադրիչների մոլեկուլային կառուցվածքի առանձնահատկությունները։ Մպինային ռելակսացիայի տեսության հիման վրա կատարված ԷՊՌ սպեկտրերի անալիզի օգնությամբ ստացված և հետազոտված են կարգի պարամետրի և պտույտի ակտիվացիայի էներգիայի կախվածությունները ջերմաստիձանից և ՀԲ համակարգի բաղադրությունից, ինչպես նաև հիդրոդինամիկ մոդելի շրջանակներում գնահատված են համակարգերի լոկալ մածուցիկության արժեքները։ Հաստատված է մակածված և ռեննտրանտ փուլերի հայտնությունը։ Ցույց է տրված, որ ոչ կենտրոնասիմետրիկ մոլեկուլներով ՆՀԲ համակարգերում ակտիվացիայի էներգիայի և ջերմակայունության միջն կորելացիան պետք է լինի հակառակ համեմատած Մայեր-Զաուպեի մոդելի հետ։

## INFLUENCE OF THE MOLECULAR STRUCTURE OF COMPONENTS ON THE INDUCTION OF MESOPHASES IN NEMATIC LIQUID CRYSTAL SYSTEMS

#### L.S. BEZHANOVA, Z.V. BAGHDASARYAN, M.L. BABURYAN

In the thermal range of mesophase existence, taking into consideration the peculiarities of molecular structure of components, the dielectric characteristics of nematic liquid crystals (NLC) are studied. The dependences of the ordering parameter and activation energy on the temperature and LC system composition are obtained and investigated by means of EPR spectra analysis based on the spin relaxation theory. Within the framework of hydrodynamic model the values of local viscosity of systems are estimated. The appearance of the induced and reentrant mesophases is established. It is shown that in NLC systems with noncenter-symmetric molecules the correlation between the activation energy and thermostability must be inverse in comparison with the Maier-Saupe model.

УДК 532.783

# ВЛИЯНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ КОМПОНЕНТОВ НА ИНДУЦИРОВАНИЕ МЕЗОФАЗ В НЕМАТИЧЕСКИХ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

## Л.С. БЕЖАНОВА, З.В. БАГДАСАРЯН, М.Л. БАБУРЯН

Институт прикладных проблем физики НАН Армении

(Поступила в редакцию 3 мая 2006 г.)

С учетом особенностей молекулярной структуры компонентов исследованы диэлектрические свойства нематических жидкокристаллических (НЖК) систем в температурном интервале существования мезофаз. С помощью анализа спектров ЭПР, проведенного на основе теории спиновой релаксации, получены и исследованы зависимости параметра порядка и энергии активации вращения от температуры и состава ЖК системы, а также оценены значения локальной вязкости систем в рамках гидродинамической модели. Установлено появление индуцированной и возвратной мезофаз. Показано, что в НЖК системах с нецентросимметричными молекулами корреляция между энергией активации и термостабильностью должна быть обратной по сравнению с моделью Майера-Заупе.

Фазовые диаграммы бинарных систем нематических жидких кристаллов (НЖК) за счет многообразия фазовых реакций и образования областей расслаивания значительно усложняются. В реальных жидкокристаллических системах наблюдаются сильные межмолекулярные взаимодействия, что может приводить к отклонениям рассчитанных данных от экспериментальных и к появлению индуцированных и возвратных фаз. И хотя при рассмотрении термотропного фазового перехода требуется учет энергии, зависящей от ориентации, стерические факторы (силы отталкивания) играют преобладающую роль, поскольку они ответственны за упаковку и, следовательно, за межмолекулярные расстояния. Таким образом, структура жидких кристаллов определяется в основном стерическими факторами, ими же определяется и температура просветления. При классификации ЖК мезофаз мы располагаем достаточно подробными сведениями о геометрии таких систем в целом, однако, не имеем достоверных сведений о динамических свойствах этих систем. Вопросы молекулярной структуры и динамических свойств ЖК мезофаз связаны с общей проблемой: каким образом скорости молекулярных движений связаны со специфической структурой жидкокристаллической фазы.

Настоящая работа посвящена исследованию молекулярной подвижности, индуцирования смектической и возвратной нематической фаз, а также зависимости термостабильности мезофаз от молекулярной структуры и состава НЖК бинарной системы; исследованию диэлектрических характеристик вблизи фазовых переходов. Объектами исследования являются нематические жидкие кристаллы: 4-цианофенил-4'-гептилбензоат -C7H15-C6H4-COO-C6H4-CN [Kp-43°C-H-58°C-ИЖ] – {I}; 4-пентил-4'-цианобифенил -C5H11-C6H4-C6H4-CN [Kp-24°C-H-36°C-ИЖ] – {II}; гексилоксифенил-4'-бутилбензоат -C4H9-C6H4-COO-C6H4-OC6H13 [Kp-32°C-H-49°C-ИЖ] – {III} и их бинарные системы.

Диэлектрические измерения проводились с помощью устройства, действующего по принципу мостов Шеринга. Диэлектрическим измерениям подверглись планарно ориентированные в ячейках типа "сэндвич" ЖК образцы с толщиной слоя 10 мкм. Измерения проводились на низких частотах, при которых ориентационная поляризация меняется в такт с внешним полем.

ЭПР исследования проводились на спектрометре ЭПР "РЭ-1301", работающем на частоте 9 ГГц, с помощью спинового зонда 2,2,6,6-тетраметил-4-оксипиперидин-1-оксил (ТМОПО). Исследуемые системы получали смешиванием двух жидких кристаллов в изотропном состоянии. К смеси добавляли радикал ТМОПО в таком количестве, чтобы свести к минимуму уширение из-за диполь-дипольного взаимодействия (концентрация радикала составляла 10<sup>-4</sup> моль/л). Образцы помещались в резонатор в тонкостенных стеклянных ампулах с внешним диаметром 5 мм. Температура исследуемого образца измерялась с точностью 0,1°С.

Спектры ЭПР парамагнитного зонда ТМОПО в ЖК представляют собой три узкие, хорошо разрешенные линии сверхтонкой структуры, возникающие за счет взаимодействия неспаренного электрона с ядерным спином атома азота. Анализ этих спектров проведен на основе теории спиновой релаксации [1-3], согласно которой в области быстрого вращения ширины  $\Gamma_2^{-1}$  трех резонансных линий поглощения ( $m = 0,\pm 1$ ; где m – ядерное квантовое число) в наиболее общем виде определяются соотношением

$$\Gamma_{2^{-1}} = (A + B m + C m^2) \chi + \tau, \qquad (1)$$

где  $\chi$  не зависит от *m* и вводится для учета всех возможных вкладов, не связанных с рассматриваемым механизмом уширения и принимается равным  $\chi = (1/3)A$  [3],  $\tau$  – время корреляции вращения радикала, а параметры A,B,C зависят от величины магнитной анизотропии и скорости молекулярной переориентации в жидкости.

Для упрощения анализа спектров ЭПР предполагается, что тензор вращательной диффузии D является аксиально симметричным. Отметим, что координатная система (x, y, z)- неподвижная лабораторная система, ось z которой направлена по директору, а оси x, y – в перпендикулярной оси z плоскости. Причем,  $A_{xx} = A_{yy} = A_{\perp}$ ,  $A_{zz} = A_{\parallel}$ ,  $a_N$  – среднее значение константы сверхтонкого расщепления:  $a_N = 1/3(A_{x'x'} + A_{y'y'} + A_{z'z'})$ , где  $A_{x'x'} = 5,2$  Гс,  $A_{y'y'} = 5,2$  Гс,  $A_{y'y'} = 31$  Гс есть главные значения тензора константы сверхтонкого расщепления ТМОПО в координатной системе (x', y', z'), связанной с радикальным фрагментом: ось x' выбрана вдоль связи N–O, ось z' – вдоль направления 2 $p\pi$ -орбитали атома азота и ось y'перпендикулярна двум другим осям. А – константа сверхтонкого расщепления экспериментального спектра в случае, когда постоянное магнитное поле Н параллельно оси z,  $A_{\perp}$  константа сверхтонкого расщепления при **H**  $\perp z$ ;  $a'_{N} = 1/3(A_{\parallel} + 2A_{\perp})$  и вносится в качестве поправки в выражение для вычисления параметра порядка  $S = [(A_{\parallel} - A_{\perp})/(A_{z'z'} - A_{x'x'})] \cdot a_N / a_N$ .  $D_3$  – компонент вращательной диффузии вокруг оси *z*, а  $D_1$  – компонент вокруг осей x и y.  $D_1$  и  $D_3$  определяются с помощью соответствующих времен корреляции, которые можно вычислить из спектров ЭПР при помощи уравнения [3]

$$T_{2}^{-1} = m^{2} \frac{4\pi^{2}}{5} \xi^{2} \left\{ A_{0}^{2} \tau_{0} \left[ \frac{8}{3} - \left(1 + \omega_{a}^{2} \tau_{0}^{2}\right)^{-1} - \frac{1}{3} \left(1 + \omega_{0}^{2} \tau_{0}^{2}\right)^{-1} \right] + 2A_{2}^{2} \tau_{0} \times \left[ \frac{8}{3} - \left(1 + \omega_{a}^{2} \tau_{2}^{2}\right)^{-1} - \frac{1}{3} \left(1 + \omega_{0}^{2} \tau_{2}^{2}\right)^{-1} \right] \right\} + m \frac{\pi}{10} \omega_{0} \xi \left\{ g_{0} A_{0} \tau_{0} \left[ \frac{16}{3} + 4 \left(1 + \omega_{0}^{2} \tau_{0}^{2}\right)^{-1} \right] + 2g_{2} A_{2} \tau_{2} \times \left[ \frac{16}{3} + 4 \left(1 + \omega_{0}^{2} \tau_{2}^{2}\right)^{-1} \right] \right\} + I \left(I + 1\right) \frac{4\pi^{2}}{5} \xi^{2} \left\{ A_{0}^{2} \tau_{0} \left[ \left(1 + \omega_{a}^{2} \tau_{0}^{2}\right)^{-1} + \frac{7}{3} \left(1 + \omega_{0}^{2} \tau_{0}^{2}\right)^{-1} \right] + 2A_{2}^{2} \tau_{2} \left[ \left(1 + \omega_{a}^{2} \tau_{2}^{2}\right)^{-1} + \frac{7}{3} \left(1 + \omega_{0}^{2} \tau_{2}^{2}\right)^{-1} \right] \right\} + \frac{\omega_{0}^{2}}{80} \left\{ g_{0}^{2} \tau_{0} \times \left[ \frac{8}{3} + 2 \left(1 + \omega_{0}^{2} \tau_{0}^{2}\right)^{-1} \right] + 2g_{2}^{2} \tau_{2} \times \left[ \frac{8}{3} + 2 \left(1 + \omega_{0}^{2} \tau_{0}^{2}\right)^{-1} \right] \right\} + \chi,$$

где  $\xi = |\gamma_e| \gamma_N h/2\pi$ ,  $\omega_{\alpha} = a_N |\gamma_e|/2$ ,  $\tau_0^{-1} = 6D_1$ ,  $\tau_2^{-1} = 2D_1 + 4D_3$ ,  $\omega_0$  – резонансная частота ЭПР,  $\gamma_e, \gamma_N$  – гиромагнитные отношения для свободного электрона и ядра азота, I – спин ядра атома азота. Величины  $A_0, A_2, g_0, g_2$  определяются через компоненты тензоров  $\hat{A}$  и  $\hat{g}$  в системе координат, где эти тензоры диагональны. В частности,  $A_0 = (3/2)^{1/2} (A_{z'z'} - a_N), A_2 = (A_{x'x'} - A_{y'y'})/2$  [4].

Анализ ширины линии спектров ЭПР и расчеты времен корреляции  $\tau_i$  по В и С с помощью (3) показывают, что условие  $\tau_i = \tau_i$  (i = 0, 2) выполняется, когда зонд в среде ориентируется таким образом, что ось x' становится параллельной оси z лабораторной системы отсчета, а параметр анизотропии вращения  $Q = \tau_{\perp} / \tau_{\parallel}$  в исследуемых ЖК системах в области "быстрых вращений" ( $\omega_0^2 \tau_2^2 >> 1$ ,  $\omega_{\alpha}^2 \tau_2^2 << 1$ ) не зависит от температуры и равен  $Q = 2, 6 \pm 0, 3$ . Само значение Q свидетельствует о существенной роли межмолекулярного взаимодействия в определении симметрии вращения радикала, а постоянство параметра Q соответствует гидродинамической модели вращения. В случае, когда поле **H** направлено вдоль оси симметрии z, ширина компонент спектра будет определяться лишь вращением радикала с частотой  $\tau_{\perp}^{-1}$ . В рамках этой модели, с помощью выражения

$$\tau_{\perp} = \frac{4\pi\eta r^3}{3kT} , \qquad (3)$$

где r – эффективный радиус радикала, k – постоянная Больцмана, T – температура образца, нами оценены значения локальной вязкости  $\eta$  исследуемых ЖК систем, которые приведены в табл.1.

t(C	{III}/ <b>50%</b> {I}	{III}/20%{I}	{III}/50%{II}	{III}/20%{II}
	<i>η</i> , мПа∙с	<i>η</i> , мПа∙с	η, мПа∙с	<i>η</i> , мПа·с
35	12	11	16	13
39	10	28	14	11
44	5	2	9	6

Табл.1. Значения коэффициента вязкости ЖК систем при различных температурах.

Концентрационные зависимости локальной вязкости  $\eta$  свидетельствуют об изменении характера межмолекулярного взаимодействия, которое нами связывается с разрушением молекулярных ассоциатов индивидуальных компонентов и образованием новых смешанных ассоциатов, что может привести к индуцированию новых мезофаз. В исследуемых ЖК системах, кроме системы {III}/20%{I}, с понижением температуры значение  $\eta$ , как и следовало ожидать, возрастает. В ЖК системе {III}/20%{I} значение  $\eta$  при понижении температуры от 44°C до 39°C резко увеличивается от значения 2 мПа·с до 28 мПа·с. При дальнейшем понижении температуры до 35°C значение  $\eta$  резко уменьшается и принимает значение  $\eta = 11$  мПа·с. Как будет показано ниже, такое поведение  $\eta$  в области температур 44-35°C подтверждает образование смектической фазы в данной системе в области температур 37-41°C, а факт уменьшения  $\eta$  при температуре 35°C находится в полном согласии с поведением поперечной составляющей диэлектрической проницаемости  $\varepsilon_{\perp}$  и параметра порядка *S* в температурной области 35-37°C, в которой будет установлено образование возвратной нематической мезофазы.

Результаты расчета параметра порядка S в зависимости от температуры и состава системы приведены на рис.1. Во всех индивидуальных соединениях и их бинарных системах при фазовом переходе ЖК(ИЖ S скачкообразно уменьшается.

Поведение *S* в температурном интервале существования мезофазы во всех исследованных объектах, кроме бинарной системы {III}/20%{I}, схоже. Для системы {III}/20%{I} поведение *S* в температурном интервале 41-45 °C совпадает с поведением *S* в остальных системах. Однако, для данной системы, вблизи точки t = 41 °C, с понижением температуры значение *S* увеличивается и в определенном температурном интервале (41-37 °C) принимает характерные для смектической фазы значения. Из рис.1 видно также, что при дальнейшем понижении темпертуры, вблизи точки t = 37 °C, *S* в указанной системе уменьшается, принимая значения, соответствующие нематической фазе. Такое поведение параметра порядка указывает на индуцирование в ЖК системе {III}/20%{I} смектической и возвратной нематической мезофаз. Тот факт, что в ЖК системах {III}/30%{I} и {III}/50%{I} вышеописанного поведения *S* не наблюдается (рис.1), свидетельствует о том, что увеличение концентрации компонента {I} не приводит к индуцированию новой фазы. Факт исчезновения индуцированных фаз в НЖК системах при замене компонента {I] соединением {II}, по-видимому, можно связать с различием энергии взаимодействия молекул в димерах указанных соединений. Согласно [5], силы притяжения и отталкивания распределены вдоль молекулы и
во взаимодействии между двумя молекулами участвует та часть распределенных сил, которая соответствует участкам молекул, находящихся в непосредственной близости друг от друга. Резонно предположить, что в НЖК системах {III}/{II} влияние соединения {III} на димеры компонента {II}, вызванное структурными особенностями молекул {III}, уменьшается, что приводит к невозможности индуцирования мезофаз в указанной системе.



Рис..1. Зависимость параметра порядка *S* от температуры в ЖК системах:  $1 - \{I\}, 2 - \{II\}, 3 - \{III\}, 4 - \{III\}/20\%\{I\}, 5 - \{III\}/30\%\{I\}, 6 - \{III\}/50\%\{I\}, 7 - \{III\}/20\%\{II\}, 8 - \{III\}/50\%\{II\}.$ 

Вышеописанное изменение  $\eta$  и параметра порядка *S*, вызванное индуцированием мезофаз и их исчезновением в зависимости от температуры и состава системы, подтверждается и экспериментальными результатами диэлектрических измерений (рис.2). Отметим некоторые особенности диэлектрических свойств {I}, {II} и {III}-ЖК различных химических классов. Наименьшее значение  $\varepsilon_{\perp}$  соответствует соединению {II}. Наличие мостиковой группировки СОО у {I} и {III}, которая вносит вклад как в параллельную, так и в перпендикулярную составляющие ориентационной поляризации, а также алкилокси-группы в конце молекулы {III}, приводит к относительному увеличению поперечного дипольного момента молекул, а значит и к относительному увеличению  $\varepsilon_{\perp}$  (рис.2).



а

Рис.2. Температурные зависимости диелектрической пронициаемости  $\mathcal{E}_{\perp}$  в ЖК системах: a) 1 – {II}, 2 – {III}, 3 – {I}; 6) 1 – {III}/20%{II}, 2 –{III}/25%{II}, 3 – {III}/30%{II}, 4 – {III}/50%{II}; в) 1 – {III}/20%{I}, 2 –{III}/25%{I}, 3 – {III}/30%{I}, 4 – {III}/50%{I}.

б

Таким образом, становится очевидным влияние молекулярной структуры исследуемых НЖК на значение поперечной составляющей диэлектрической проницаемости.

Влияние смектического порядка на температурной шкале также сказывается на диэлектрических свойствах системы {III}/{I} вследствие дипольной корреляции молекул, приводя к увеличению  $\mathcal{E}_{\perp}$  (рис.2). Из температурного хода  $\mathcal{E}_{\perp}$  для систем {III}/{II} следует также, что данные системы обладают одной единственной мезофазой – нематической. Что касается систем {III}/{I}, то, как было отмечено, при определенных концентрациях компонентов в них индуцируются смектическая и возвратная нематическая мезофазы. Заметим, что точка плавления указанных систем не зависит от концентрации компонентов. Однако, обратим внимание на то, что в отличие от точки плавления, точки просветления  $t_{np}$  с увеличением концентрации {II} в системах {III}/{II} продвигаются вперед, то есть повышается термостабильность мезофазы. Полученные результаты, обусловленные сложным характером межмолекулярного взаимодействия в НЖК системах, указывают на необходимость учета специфики взаимодействующих веществ разных химических классов.

Расчет энергии активации вращения  $E_a$  с помощью времен релаксации  $\tau_i$  для разных систем {III}/{I} показывает, что минимальное значение  $E_a = 6,6$  ккал/моль соответствует ЖК системе, когда {I} составляет 20 моль% смеси, а наибольшее  $E_a = 18,4$  ккал/моль – индивидуальному {III} (рис.3). Заметим что минимальная энергия активации вращательной диффузии наблюдается при таких соотношениях концентрации компонентов, при которых индуцирована смектическая фаза.



Рис.3. Концентрационная зависимость энергии активации  $E_a$  (1) и температуры просветления  $t_{np}$  (2) для {III}/{I} ЖК системы.

Полученные неаддитивные концентрационные зависимости  $t_{np}$  и  $E_a$  параметров бинарных систем НЖК (рис.3) свидетельствуют об изменении характера межмолекулярного взаимодействия по сравнению с исходными компонентами. Отметим, что уменьшение энергии активации  $E_a$  при одновременном увеличении температуры просветления (рис.1) не может быть объяснено в рамках теории среднего поля Майера–Заупе, поскольку, согласно теории, высота потенциального барьера, который необходимо преодолеть вращающейся частице, т.е. энергия активации  $E_a$  пропорциональна температуре просветления  $t_{np}$  и должна увеличиваться с увеличением  $t_{np}$  [6]. Однако экспериментально наблюдается обратная зависимость.

Если считать, что исходные компоненты центросимметричны, а их бинарные системы (c = 20-50%) нецентросимметричны из-за разрушения димеров {I} и {II} и образования ассоциатов из молекул цианопроизводного и матрицы {III} [7], тогда становится возможной интерпретация полученных результатов в рамках работы [8], в которой показано, что в нематиках с нецентросимметричными молекулами (или ассоциатами) корреляция между энергией активации и термостабильностью должна быть обратной по сравнению с моделью [6].

Поскольку для компонентов {I} и {II} характерно образование димеров [7], то в их системах {III}/{I} и {III}/{II} разной концентрации возможно существенно нелинейное изменение корреляционных факторов и образование перекрестных димеров, которое может привести к увеличению  $t_{np}$  и уменьшению  $E_a$ .

#### ЛИТЕРАТУРА

1. K.Matsuura, Y.Kotake, K.Kuwata. Mol. Cryst. Liq. Cryst., 140, 327 (1986).

- 2. Ч.Сликтер. Основы теории магнитного резонанса. М., Мир, 1981.
- 3. S.A.Goldman, G.V.Bruno, C.F.Polnaszek, J.H. Freed. J. Chem. Phys., 56, 716 (1972).
- 4. А.Н.Кузнецов. Метод спинового зонда (основы и применение). М., Наука, 1976.
- 5. S.M.Yayloyan, L.S.Bezhanova, A.M.Yayloyan. Mol. Cryst. Liq. Cryst., 365, 747 (2001).
- 6. A.C.Diogo, A.F.Martins. Mol. Cryst. Liq. Cryst., 66, 133 (1981).
- 7. А.Ц.Саркисян, Л.С.Бежанова. Ж. физ. хим., 63, 2504 (1989).

8. В.В.Беляев, А.А.Герасимов, М.Ф.Гребенкин, Л.Н.Лисецкий. ЖЭТФ, 29, 815 (1984).

# ՆԵՄԱՏԻԿ ՀԵՂՈՒԿ ԲՅՈՒՐԵՂԱԿԱՆ ՀԱՄԱԿԱՐԳԵՐՈՒՄ ՄԵԶՈՓՈՒԼԵՐԻ ՄԱԿԱԾՄԱՆ ՎՐԱ ԲԱՂԱԴՐԻՉՆԵՐԻ ՄՈԼԵԿՈՒԼԱՅԻՆ ԿԱՌՈՒՑՎԱԾՔԻ ԱԶԴԵՑՈՒԹՅՅՈՒՆԸ

# Լ.Ս. ԲԵԺԱՆՈՎԱ, Զ.Վ. ԲԱՂԴԱՍԱՐՅԱՆ, Մ.Լ. ԲԱԲՈՒՐՅԱՆ

Մեզոփուլերի գոյության ջերմաստիձանային ինտերվալում հետազոտված են նեմատիկ հեղուկ բյուրեղական (ՆՀԲ) համակարգերի դիէլեկտրական հատկությունները՝ հաշվի առնելով բաղադրիչների մոլեկուլային կառուցվածքի առանձնահատկությունները։ Մպինային ռելակսացիայի տեսության հիման վրա կատարված ԷՊՌ սպեկտրերի անալիզի օգնությամբ ստացված և հետազոտված են կարգի պարամետրի և պտույտի ակտիվացիայի էներգիայի կախվածությունները ջերմաստիձանից և ՀԲ համակարգի բաղադրությունից, ինչպես նաև հիդրոդինամիկ մոդելի շրջանակներում գնահատված են համակարգերի լոկալ մածուցիկության արժեքները։ Հաստատված է մակածված և ռեննտրանտ փուլերի հայտնությունը։ Ցույց է տրված, որ ոչ կենտրոնասիմետրիկ մոլեկուլներով ՆՀԲ համակարգերում ակտիվացիայի էներգիայի և ջերմակայունության միջն կորելացիան պետք է լինի հակառակ համեմատած Մայեր-Զաուպեի մոդելի հետ։

# INFLUENCE OF THE MOLECULAR STRUCTURE OF COMPONENTS ON THE INDUCTION OF MESOPHASES IN NEMATIC LIQUID CRYSTAL SYSTEMS

#### L.S. BEZHANOVA, Z.V. BAGHDASARYAN, M.L. BABURYAN

In the thermal range of mesophase existence, taking into consideration the peculiarities of molecular structure of components, the dielectric characteristics of nematic liquid crystals (NLC) are studied. The dependences of the ordering parameter and activation energy on the temperature and LC system composition are obtained and investigated by means of EPR spectra analysis based on the spin relaxation theory. Within the framework of hydrodynamic model the values of local viscosity of systems are estimated. The appearance of the induced and reentrant mesophases is established. It is shown that in NLC systems with noncenter-symmetric molecules the correlation between the activation energy and thermostability must be inverse in comparison with the Maier-Saupe model.

УДК 532.783

# ВЛИЯНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ КОМПОНЕНТОВ НА ИНДУЦИРОВАНИЕ МЕЗОФАЗ В НЕМАТИЧЕСКИХ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

# Л.С. БЕЖАНОВА, З.В. БАГДАСАРЯН, М.Л. БАБУРЯН

Институт прикладных проблем физики НАН Армении

(Поступила в редакцию 3 мая 2006 г.)

С учетом особенностей молекулярной структуры компонентов исследованы диэлектрические свойства нематических жидкокристаллических (НЖК) систем в температурном интервале существования мезофаз. С помощью анализа спектров ЭПР, проведенного на основе теории спиновой релаксации, получены и исследованы зависимости параметра порядка и энергии активации вращения от температуры и состава ЖК системы, а также оценены значения локальной вязкости систем в рамках гидродинамической модели. Установлено появление индуцированной и возвратной мезофаз. Показано, что в НЖК системах с нецентросимметричными молекулами корреляция между энергией активации и термостабильностью должна быть обратной по сравнению с моделью Майера-Заупе.

Фазовые диаграммы бинарных систем нематических жидких кристаллов (НЖК) за счет многообразия фазовых реакций и образования областей расслаивания значительно усложняются. В реальных жидкокристаллических системах наблюдаются сильные межмолекулярные взаимодействия, что может приводить к отклонениям рассчитанных данных от экспериментальных и к появлению индуцированных и возвратных фаз. И хотя при рассмотрении термотропного фазового перехода требуется учет энергии, зависящей от ориентации, стерические факторы (силы отталкивания) играют преобладающую роль, поскольку они ответственны за упаковку и, следовательно, за межмолекулярные расстояния. Таким образом, структура жидких кристаллов определяется в основном стерическими факторами, ими же определяется и температура просветления. При классификации ЖК мезофаз мы располагаем достаточно подробными сведениями о геометрии таких систем в целом, однако, не имеем достоверных сведений о динамических свойствах этих систем. Вопросы молекулярной структуры и динамических свойств ЖК мезофаз связаны с общей проблемой: каким образом скорости молекулярных движений связаны со специфической структурой жидкокристаллической фазы.

Настоящая работа посвящена исследованию молекулярной подвижности, индуцирования смектической и возвратной нематической фаз, а также зависимости термостабильности мезофаз от молекулярной структуры и состава НЖК бинарной системы; исследованию диэлектрических характеристик вблизи фазовых переходов. Объектами исследования являются нематические жидкие кристаллы: 4-цианофенил-4'-гептилбензоат -C7H15-C6H4-COO-C6H4-CN [Kp-43°C-H-58°C-ИЖ] – {I}; 4-пентил-4'-цианобифенил -C5H11-C6H4-C6H4-CN [Kp-24°C-H-36°C-ИЖ] – {II}; гексилоксифенил-4'-бутилбензоат -C4H9-C6H4-COO-C6H4-OC6H13 [Kp-32°C-H-49°C-ИЖ] – {III} и их бинарные системы.

Диэлектрические измерения проводились с помощью устройства, действующего по принципу мостов Шеринга. Диэлектрическим измерениям подверглись планарно ориентированные в ячейках типа "сэндвич" ЖК образцы с толщиной слоя 10 мкм. Измерения проводились на низких частотах, при которых ориентационная поляризация меняется в такт с внешним полем.

ЭПР исследования проводились на спектрометре ЭПР "РЭ-1301", работающем на частоте 9 ГГц, с помощью спинового зонда 2,2,6,6-тетраметил-4-оксипиперидин-1-оксил (ТМОПО). Исследуемые системы получали смешиванием двух жидких кристаллов в изотропном состоянии. К смеси добавляли радикал ТМОПО в таком количестве, чтобы свести к минимуму уширение из-за диполь-дипольного взаимодействия (концентрация радикала составляла 10<sup>-4</sup> моль/л). Образцы помещались в резонатор в тонкостенных стеклянных ампулах с внешним диаметром 5 мм. Температура исследуемого образца измерялась с точностью 0,1°С.

Спектры ЭПР парамагнитного зонда ТМОПО в ЖК представляют собой три узкие, хорошо разрешенные линии сверхтонкой структуры, возникающие за счет взаимодействия неспаренного электрона с ядерным спином атома азота. Анализ этих спектров проведен на основе теории спиновой релаксации [1-3], согласно которой в области быстрого вращения ширины  $\Gamma_2^{-1}$  трех резонансных линий поглощения ( $m = 0,\pm 1$ ; где m – ядерное квантовое число) в наиболее общем виде определяются соотношением

$$\Gamma_{2^{-1}} = (A + B m + C m^2) \chi + \tau, \qquad (1)$$

где  $\chi$  не зависит от *m* и вводится для учета всех возможных вкладов, не связанных с рассматриваемым механизмом уширения и принимается равным  $\chi = (1/3)A$  [3],  $\tau$  – время корреляции вращения радикала, а параметры A,B,C зависят от величины магнитной анизотропии и скорости молекулярной переориентации в жидкости.

Для упрощения анализа спектров ЭПР предполагается, что тензор вращательной диффузии D является аксиально симметричным. Отметим, что координатная система (x, y, z)- неподвижная лабораторная система, ось z которой направлена по директору, а оси x, y – в перпендикулярной оси z плоскости. Причем,  $A_{xx} = A_{yy} = A_{\perp}$ ,  $A_{zz} = A_{\parallel}$ ,  $a_N$  – среднее значение константы сверхтонкого расщепления:  $a_N = 1/3(A_{x'x'} + A_{y'y'} + A_{z'z'})$ , где  $A_{x'x'} = 5,2$  Гс,  $A_{y'y'} = 5,2$  Гс,  $A_{y'y'} = 31$  Гс есть главные значения тензора константы сверхтонкого расщепления ТМОПО в координатной системе (x', y', z'), связанной с радикальным фрагментом: ось x' выбрана вдоль связи N–O, ось z' – вдоль направления 2 $p\pi$ -орбитали атома азота и ось y'перпендикулярна двум другим осям. А – константа сверхтонкого расщепления экспериментального спектра в случае, когда постоянное магнитное поле Н параллельно оси z,  $A_{\perp}$  константа сверхтонкого расщепления при **H**  $\perp z$ ;  $a'_{N} = 1/3(A_{\parallel} + 2A_{\perp})$  и вносится в качестве поправки в выражение для вычисления параметра порядка  $S = [(A_{\parallel} - A_{\perp})/(A_{z'z'} - A_{x'x'})] \cdot a_N / a_N$ .  $D_3$  – компонент вращательной диффузии вокруг оси *z*, а  $D_1$  – компонент вокруг осей x и y.  $D_1$  и  $D_3$  определяются с помощью соответствующих времен корреляции, которые можно вычислить из спектров ЭПР при помощи уравнения [3]

$$T_{2}^{-1} = m^{2} \frac{4\pi^{2}}{5} \xi^{2} \left\{ A_{0}^{2} \tau_{0} \left[ \frac{8}{3} - \left(1 + \omega_{a}^{2} \tau_{0}^{2}\right)^{-1} - \frac{1}{3} \left(1 + \omega_{0}^{2} \tau_{0}^{2}\right)^{-1} \right] + 2A_{2}^{2} \tau_{0} \times \left[ \frac{8}{3} - \left(1 + \omega_{a}^{2} \tau_{2}^{2}\right)^{-1} - \frac{1}{3} \left(1 + \omega_{0}^{2} \tau_{2}^{2}\right)^{-1} \right] \right\} + m \frac{\pi}{10} \omega_{0} \xi \left\{ g_{0} A_{0} \tau_{0} \left[ \frac{16}{3} + 4 \left(1 + \omega_{0}^{2} \tau_{0}^{2}\right)^{-1} \right] + 2g_{2} A_{2} \tau_{2} \times \left[ \frac{16}{3} + 4 \left(1 + \omega_{0}^{2} \tau_{2}^{2}\right)^{-1} \right] \right\} + I \left(I + 1\right) \frac{4\pi^{2}}{5} \xi^{2} \left\{ A_{0}^{2} \tau_{0} \left[ \left(1 + \omega_{a}^{2} \tau_{0}^{2}\right)^{-1} + \frac{7}{3} \left(1 + \omega_{0}^{2} \tau_{0}^{2}\right)^{-1} \right] + 2A_{2}^{2} \tau_{2} \left[ \left(1 + \omega_{a}^{2} \tau_{2}^{2}\right)^{-1} + \frac{7}{3} \left(1 + \omega_{0}^{2} \tau_{2}^{2}\right)^{-1} \right] \right\} + \frac{\omega_{0}^{2}}{80} \left\{ g_{0}^{2} \tau_{0} \times \left[ \frac{8}{3} + 2 \left(1 + \omega_{0}^{2} \tau_{0}^{2}\right)^{-1} \right] + 2g_{2}^{2} \tau_{2} \times \left[ \frac{8}{3} + 2 \left(1 + \omega_{0}^{2} \tau_{0}^{2}\right)^{-1} \right] \right\} + \chi,$$

где  $\xi = |\gamma_e| \gamma_N h/2\pi$ ,  $\omega_{\alpha} = a_N |\gamma_e|/2$ ,  $\tau_0^{-1} = 6D_1$ ,  $\tau_2^{-1} = 2D_1 + 4D_3$ ,  $\omega_0$  – резонансная частота ЭПР,  $\gamma_e, \gamma_N$  – гиромагнитные отношения для свободного электрона и ядра азота, I – спин ядра атома азота. Величины  $A_0, A_2, g_0, g_2$  определяются через компоненты тензоров  $\hat{A}$  и  $\hat{g}$  в системе координат, где эти тензоры диагональны. В частности,  $A_0 = (3/2)^{1/2} (A_{z'z'} - a_N), A_2 = (A_{x'x'} - A_{y'y'})/2$  [4].

Анализ ширины линии спектров ЭПР и расчеты времен корреляции  $\tau_i$  по В и С с помощью (3) показывают, что условие  $\tau_i = \tau_i$  (i = 0, 2) выполняется, когда зонд в среде ориентируется таким образом, что ось x' становится параллельной оси z лабораторной системы отсчета, а параметр анизотропии вращения  $Q = \tau_{\perp} / \tau_{\parallel}$  в исследуемых ЖК системах в области "быстрых вращений" ( $\omega_0^2 \tau_2^2 >> 1$ ,  $\omega_{\alpha}^2 \tau_2^2 << 1$ ) не зависит от температуры и равен  $Q = 2, 6 \pm 0, 3$ . Само значение Q свидетельствует о существенной роли межмолекулярного взаимодействия в определении симметрии вращения радикала, а постоянство параметра Q соответствует гидродинамической модели вращения. В случае, когда поле **H** направлено вдоль оси симметрии z, ширина компонент спектра будет определяться лишь вращением радикала с частотой  $\tau_{\perp}^{-1}$ . В рамках этой модели, с помощью выражения

$$\tau_{\perp} = \frac{4\pi\eta r^3}{3kT} , \qquad (3)$$

где r – эффективный радиус радикала, k – постоянная Больцмана, T – температура образца, нами оценены значения локальной вязкости  $\eta$  исследуемых ЖК систем, которые приведены в табл.1.

t(C	{III}/ <b>50%</b> {I}	{III}/20%{I}	{III}/50%{II}	{III}/20%{II}
	<i>η</i> , мПа∙с	<i>η</i> , мПа∙с	η, мПа∙с	<i>η</i> , мПа·с
35	12	11	16	13
39	10	28	14	11
44	5	2	9	6

Табл.1. Значения коэффициента вязкости ЖК систем при различных температурах.

Концентрационные зависимости локальной вязкости  $\eta$  свидетельствуют об изменении характера межмолекулярного взаимодействия, которое нами связывается с разрушением молекулярных ассоциатов индивидуальных компонентов и образованием новых смешанных ассоциатов, что может привести к индуцированию новых мезофаз. В исследуемых ЖК системах, кроме системы {III}/20%{I}, с понижением температуры значение  $\eta$ , как и следовало ожидать, возрастает. В ЖК системе {III}/20%{I} значение  $\eta$  при понижении температуры от 44°C до 39°C резко увеличивается от значения 2 мПа·с до 28 мПа·с. При дальнейшем понижении температуры до 35°C значение  $\eta$  резко уменьшается и принимает значение  $\eta = 11$  мПа·с. Как будет показано ниже, такое поведение  $\eta$  в области температур 44-35°C подтверждает образование смектической фазы в данной системе в области температур 37-41°C, а факт уменьшения  $\eta$  при температуре 35°C находится в полном согласии с поведением поперечной составляющей диэлектрической проницаемости  $\varepsilon_{\perp}$  и параметра порядка *S* в температурной области 35-37°C, в которой будет установлено образование возвратной нематической мезофазы.

Результаты расчета параметра порядка S в зависимости от температуры и состава системы приведены на рис.1. Во всех индивидуальных соединениях и их бинарных системах при фазовом переходе ЖК(ИЖ S скачкообразно уменьшается.

Поведение *S* в температурном интервале существования мезофазы во всех исследованных объектах, кроме бинарной системы {III}/20%{I}, схоже. Для системы {III}/20%{I} поведение *S* в температурном интервале 41-45 °C совпадает с поведением *S* в остальных системах. Однако, для данной системы, вблизи точки t = 41 °C, с понижением температуры значение *S* увеличивается и в определенном температурном интервале (41-37 °C) принимает характерные для смектической фазы значения. Из рис.1 видно также, что при дальнейшем понижении темпертуры, вблизи точки t = 37 °C, *S* в указанной системе уменьшается, принимая значения, соответствующие нематической фазе. Такое поведение параметра порядка указывает на индуцирование в ЖК системе {III}/20%{I} смектической и возвратной нематической мезофаз. Тот факт, что в ЖК системах {III}/30%{I} и {III}/50%{I} вышеописанного поведения *S* не наблюдается (рис.1), свидетельствует о том, что увеличение концентрации компонента {I} не приводит к индуцированию новой фазы. Факт исчезновения индуцированных фаз в НЖК системах при замене компонента {I] соединением {II}, по-видимому, можно связать с различием энергии взаимодействия молекул в димерах указанных соединений. Согласно [5], силы притяжения и отталкивания распределены вдоль молекулы и во взаимодействии между двумя молекулами участвует та часть распределенных сил, которая соответствует участкам молекул, находящихся в непосредственной близости друг от друга. Резонно предположить, что в НЖК системах {III}/{II} влияние соединения {III} на димеры компонента {II}, вызванное структурными особенностями молекул {III}, уменьшается, что приводит к невозможности индуцирования мезофаз в указанной системе.



Рис..1. Зависимость параметра порядка *S* от температуры в ЖК системах:  $1 - \{I\}, 2 - \{II\}, 3 - \{III\}, 4 - \{III\}/20\%\{I\}, 5 - \{III\}/30\%\{I\}, 6 - \{III\}/50\%\{I\}, 7 - \{III\}/20\%\{II\}, 8 - \{III\}/50\%\{II\}.$ 

Вышеописанное изменение  $\eta$  и параметра порядка *S*, вызванное индуцированием мезофаз и их исчезновением в зависимости от температуры и состава системы, подтверждается и экспериментальными результатами диэлектрических измерений (рис.2). Отметим некоторые особенности диэлектрических свойств {I}, {II} и {III}-ЖК различных химических классов. Наименьшее значение  $\varepsilon_{\perp}$  соответствует соединению {II}. Наличие мостиковой группировки СОО у {I} и {III}, которая вносит вклад как в параллельную, так и в перпендикулярную составляющие ориентационной поляризации, а также алкилокси-группы в конце молекулы {III}, приводит к относительному увеличению поперечного дипольного момента молекул, а значит и к относительному увеличению  $\varepsilon_{\perp}$  (рис.2).



а

Рис.2. Температурные зависимости диелектрической пронициаемости  $\mathcal{E}_{\perp}$  в ЖК системах: a) 1 – {II}, 2 – {III}, 3 – {I}; 6) 1 – {III}/20%{II}, 2 –{III}/25%{II}, 3 – {III}/30%{II}, 4 – {III}/50%{II}; в) 1 – {III}/20%{I}, 2 –{III}/25%{I}, 3 – {III}/30%{I}, 4 – {III}/50%{I}.

б

Таким образом, становится очевидным влияние молекулярной структуры исследуемых НЖК на значение поперечной составляющей диэлектрической проницаемости.

Влияние смектического порядка на температурной шкале также сказывается на диэлектрических свойствах системы {III}/{I} вследствие дипольной корреляции молекул, приводя к увеличению  $\mathcal{E}_{\perp}$  (рис.2). Из температурного хода  $\mathcal{E}_{\perp}$  для систем {III}/{II} следует также, что данные системы обладают одной единственной мезофазой – нематической. Что касается систем {III}/{I}, то, как было отмечено, при определенных концентрациях компонентов в них индуцируются смектическая и возвратная нематическая мезофазы. Заметим, что точка плавления указанных систем не зависит от концентрации компонентов. Однако, обратим внимание на то, что в отличие от точки плавления, точки просветления  $t_{np}$  с увеличением концентрации {II} в системах {III}/{II} продвигаются вперед, то есть повышается термостабильность мезофазы. Полученные результаты, обусловленные сложным характером межмолекулярного взаимодействия в НЖК системах, указывают на необходимость учета специфики взаимодействующих веществ разных химических классов.

Расчет энергии активации вращения  $E_a$  с помощью времен релаксации  $\tau_i$  для разных систем {III}/{I} показывает, что минимальное значение  $E_a = 6,6$  ккал/моль соответствует ЖК системе, когда {I} составляет 20 моль% смеси, а наибольшее  $E_a = 18,4$  ккал/моль – индивидуальному {III} (рис.3). Заметим что минимальная энергия активации вращательной диффузии наблюдается при таких соотношениях концентрации компонентов, при которых индуцирована смектическая фаза.



Рис.3. Концентрационная зависимость энергии активации  $E_a$  (1) и температуры просветления  $t_{np}$  (2) для {III}/{I} ЖК системы.

Полученные неаддитивные концентрационные зависимости  $t_{np}$  и  $E_a$  параметров бинарных систем НЖК (рис.3) свидетельствуют об изменении характера межмолекулярного взаимодействия по сравнению с исходными компонентами. Отметим, что уменьшение энергии активации  $E_a$  при одновременном увеличении температуры просветления (рис.1) не может быть объяснено в рамках теории среднего поля Майера–Заупе, поскольку, согласно теории, высота потенциального барьера, который необходимо преодолеть вращающейся частице, т.е. энергия активации  $E_a$  пропорциональна температуре просветления  $t_{np}$  и должна увеличиваться с увеличением  $t_{np}$  [6]. Однако экспериментально наблюдается обратная зависимость.

Если считать, что исходные компоненты центросимметричны, а их бинарные системы (c = 20-50%) нецентросимметричны из-за разрушения димеров {I} и {II} и образования ассоциатов из молекул цианопроизводного и матрицы {III} [7], тогда становится возможной интерпретация полученных результатов в рамках работы [8], в которой показано, что в нематиках с нецентросимметричными молекулами (или ассоциатами) корреляция между энергией активации и термостабильностью должна быть обратной по сравнению с моделью [6].

Поскольку для компонентов {I} и {II} характерно образование димеров [7], то в их системах {III}/{I} и {III}/{II} разной концентрации возможно существенно нелинейное изменение корреляционных факторов и образование перекрестных димеров, которое может привести к увеличению  $t_{np}$  и уменьшению  $E_a$ .

#### ЛИТЕРАТУРА

1. K.Matsuura, Y.Kotake, K.Kuwata. Mol. Cryst. Liq. Cryst., 140, 327 (1986).

- 2. Ч.Сликтер. Основы теории магнитного резонанса. М., Мир, 1981.
- 3. S.A.Goldman, G.V.Bruno, C.F.Polnaszek, J.H. Freed. J. Chem. Phys., 56, 716 (1972).
- 4. А.Н.Кузнецов. Метод спинового зонда (основы и применение). М., Наука, 1976.
- 5. S.M.Yayloyan, L.S.Bezhanova, A.M.Yayloyan. Mol. Cryst. Liq. Cryst., 365, 747 (2001).
- 6. A.C.Diogo, A.F.Martins. Mol. Cryst. Liq. Cryst., 66, 133 (1981).
- 7. А.Ц.Саркисян, Л.С.Бежанова. Ж. физ. хим., 63, 2504 (1989).

8. В.В.Беляев, А.А.Герасимов, М.Ф.Гребенкин, Л.Н.Лисецкий. ЖЭТФ, 29, 815 (1984).

# ՆԵՄԱՏԻԿ ՀԵՂՈՒԿ ԲՅՈՒՐԵՂԱԿԱՆ ՀԱՄԱԿԱՐԳԵՐՈՒՄ ՄԵԶՈՓՈՒԼԵՐԻ ՄԱԿԱԾՄԱՆ ՎՐԱ ԲԱՂԱԴՐԻՉՆԵՐԻ ՄՈԼԵԿՈՒԼԱՅԻՆ ԿԱՌՈՒՑՎԱԾՔԻ ԱԶԴԵՑՈՒԹՅՅՈՒՆԸ

# Լ.Ս. ԲԵԺԱՆՈՎԱ, Զ.Վ. ԲԱՂԴԱՍԱՐՅԱՆ, Մ.Լ. ԲԱԲՈՒՐՅԱՆ

Մեզոփուլերի գոյության ջերմաստիձանային ինտերվալում հետազոտված են նեմատիկ հեղուկ բյուրեղական (ՆՀԲ) համակարգերի դիէլեկտրական հատկությունները՝ հաշվի առնելով բաղադրիչների մոլեկուլային կառուցվածքի առանձնահատկությունները։ Մպինային ռելակսացիայի տեսության հիման վրա կատարված ԷՊՌ սպեկտրերի անալիզի օգնությամբ ստացված և հետազոտված են կարգի պարամետրի և պտույտի ակտիվացիայի էներգիայի կախվածությունները ջերմաստիձանից և ՀԲ համակարգի բաղադրությունից, ինչպես նաև հիդրոդինամիկ մոդելի շրջանակներում գնահատված են համակարգերի լոկալ մածուցիկության արժեքները։ Հաստատված է մակածված և ռեննտրանտ փուլերի հայտնությունը։ Ցույց է տրված, որ ոչ կենտրոնասիմետրիկ մոլեկուլներով ՆՀԲ համակարգերում ակտիվացիայի էներգիայի և ջերմակայունության միջն կորելացիան պետք է լինի հակառակ համեմատած Մայեր-Զաուպեի մոդելի հետ։

# INFLUENCE OF THE MOLECULAR STRUCTURE OF COMPONENTS ON THE INDUCTION OF MESOPHASES IN NEMATIC LIQUID CRYSTAL SYSTEMS

#### L.S. BEZHANOVA, Z.V. BAGHDASARYAN, M.L. BABURYAN

In the thermal range of mesophase existence, taking into consideration the peculiarities of molecular structure of components, the dielectric characteristics of nematic liquid crystals (NLC) are studied. The dependences of the ordering parameter and activation energy on the temperature and LC system composition are obtained and investigated by means of EPR spectra analysis based on the spin relaxation theory. Within the framework of hydrodynamic model the values of local viscosity of systems are estimated. The appearance of the induced and reentrant mesophases is established. It is shown that in NLC systems with noncenter-symmetric molecules the correlation between the activation energy and thermostability must be inverse in comparison with the Maier-Saupe model.

УДК 621.382

# РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ В БАЗЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО ДИОДА С *p-n* ПЕРЕХОДОМ

# Н.С. АРАМЯН

# Институт радиофизики и электроники НАН Армении

(Поступила в редакцию 15 мая 2006 г.)

Получено выражение для распределения электрического поля в базе полупроводникого диода с *р-п* переходом, справедливое при произвольных уровнях инжекции, в приближении экспоненциальности распределения неравновесных носителей в базе диода. Показано, что при некотором токе через диод поле вдоль базы постоянно, что позволяет определить подвижность основных носителей (концентрация определяется из измерений барьерной емкости). Для промышленных диодов Д223Б и Д219А измерены ВАХ и дифференциальное сопротивление и вычислены подвижности электронов. Для диода Д223Б приведено распределение электрического поля при трех уровнях инжекции.

## 1. Введение

В ряде работ было показано, что полупроводниковый диод с *р-п* переходом удобно использовать для определения параметров материала базы диода, таких как концентрация свободных посителей, подвижность, а также время жизни неравновесных носителей и его зависимость от уровня инжекции [1-3]. Физические явления в полупроводниковом диоде с *р-п* переходом хорошо изучены [4–6], однако для определения параметров базы диода приходится иметь дело с распределением электрического поля вдоль базы диода, точный расч т которого, основанный на решении уравнения непрерывности для инжектированных в базу носителей, сопряжен со значительными математическими трудностями [7]. Приближ нный расч т проводят с использованием распределения носителей, полученным из решения уравнения диффузии в пренебрежении полевыми членами [8], что правомерно только при низких уровнях инжекции. При высоких уровнях инжекции данное распределение само зависит от электрического поля в базе диода, что может приводить к существенным ошибкам при определении параметров базы диода. Основным выводом приближ нного рассмотрения проблемы является то, что распределение неравновесных носителей в базе диода при высоких уровнях инжекции является экспоненциальным с длиной диффузии, зависящей от электрического поля [5,7], вследствие вытягивания носителей вглубь базы электрическим полем.

В данной работе в предположении экспененциальности распределения

неравновесных носителей вдоль базы диода получено довольно компактное выражение для электрического поля, пригодное при произвольных уровнях инжекции. Для промышленных диодов Д219А и Д223Б на основе измерений ВАХ и дифференциального активного сопротивления вычислено распределение электрического поля, а также показано, что уч,т особенностей этого распределения позволяет при известной концентрации равновесных злектронов  $n_0$  (из измерений барьерной ,мкости) определить их подвижность  $\mu_n$ .

## 2. Расч, т электрического поля

Рассмотрим "длинный" диод и предположим, что избыточная кон-центрация дырок в базе *п*-типа описывается распределением

$$\Delta p(x) = \Delta p(0) \ e^{-\alpha x},\tag{1}$$

где  $\Delta p(0)$  – избыточная концентрация в плоскости *p-n* перехода при *x* = 0,  $\alpha$  – коэффициент, зависящий от уровня инжекции и имеющий смысл обратной диффузионной длины. Коэффициент  $\alpha$  должен зависеть от *x*, поэтому в (1)  $\alpha$  является усредн, нным по длине базы параметром. Уч, т полевых членов в уравнении непрерывности позволяет совместно рассмотреть это уравнение для основных носителей – электронов и неосновных носителей – дырок. Комбинируя эти два уравнения, можно получить уравнение, не содержащее время жизни в явном виде:

$$D_{p}(b-1)\frac{d^{2}(\Delta p)}{dx^{2}} + \mu_{p}(b+1)E(x)\frac{d(\Delta p)}{dx} + \mu_{p}[(b+1)+bn_{0}]\frac{dE}{dx} = 0, \qquad (2)$$

где E(x) – электрическое поле,  $D_p$  – коэффициент диффузии дырок; b – отношение подвижности электронов к подвижности дырок;  $\mu_p$  – подвижность дырок,  $n_0$  – равновесная концентрация электронов в базе диода.

Уравнение (2) получено в предположении электрической нейтральности полупроводника:  $\Delta p = \Delta n$ . Подстановка распределения (1) в (2) позволяет получить уравнение для E(x):

$$\frac{(b+1)\Delta p(0)e^{-\alpha x} + bn_0}{\Delta p(0)e^{-\alpha x}}\frac{dE}{dx} - (b+1)\alpha E(x) + \frac{kT}{q}(b-1)\alpha^2 = 0.$$
 (3)

Уравнение (3) интегрируется методом разделения переменных, в результате получаем выражение

$$E(x) = \left(E_0 - \frac{kT}{q} \frac{b-1}{b+1}\alpha\right) \left[1 + \frac{b}{b+1} \frac{n_0}{\Delta p(0)}\right] \frac{e^{\alpha x}}{1 + \frac{b}{b+1} \frac{n_0}{\Delta p(0)}} + \frac{kT}{q} \frac{b-1}{b+1}\alpha, \quad (4)$$

где  $E_0$  – электрическое поле при x = 0.

Из (4) видно, что при относительно низких уровнях инжекции, когда  $E_0 < \frac{kT}{q} \frac{b-1}{b+1} \alpha$ , электрическое поле вглубь базы, т.е. при возрастании *х*, убывает; при относительно высоких уровнях инжекции, когда  $E_0 > \frac{kT}{a} \frac{b-1}{b+1} \alpha$ ,

электрическое поле с ростом *x* возрастает. При  $E_0 = \frac{kT}{q} \frac{b-1}{b+1} \alpha$  электрическое

поле не зависит от х и постоянно вдоль базы. Такое поведение электрического поля можно объяснить следующим образом. Из условия электрической нейтральности  $\Delta p = \Delta n$  вытекает, что диффузионные токи электронов и дырок должны быть равны в произвольном сечении базы, т.е. при любом х. При низких уровнях инжекции, когда концентрация основных носителей практически постоянна вдоль базы, для выполнения данного условия электрическое поле вблизи плоскости *p-n* перехода при x = 0 должно быть больше, чем в глубине базы. При этом разница в диффузионных токах электронов и дырок (из-за разницы в их подвижностях) компенсируется возрастанием дрейфовой составляющей тока основных носителей. При высоких уровнях инжекции происходит существенная модуляция проводимости базы инжектированными носителями, следствием чего является меньшее значение электрического поля вблизи плоскости *p-n* перехода по сравнению с электрическим полем в глубине базы. Из выражения (4) видно, что при b=1, т.е. при равенстве подвижностей электронов и дырок, проявляется только эффект модуляции проводимости базы при произвольных уровнях инжекции. Вышесказанное физически представляется очевидным, однако выражение (4), описывающее поведение электрического поля при произвольных уровнях инжекции, получено нами впервые.

Рассмотрим резкий асимметричный *p-n* переход с базой *n*-типа, для которого электронный ток при *x*=0 пренебрежимо мал [3]. Из условия равенства нулю этого тока можно получить

$$E_{0} = \frac{b \frac{n_{0}}{\Delta p_{0}}}{2 + \frac{n_{0}}{\Delta p_{0}}} E_{\infty}, \qquad E_{\infty} = \frac{I}{q \mu_{n} n_{0}}, \qquad (5)$$

где I - ток через диод, q - заряд электрона,  $\mu_n$  - подвижность электронов. Из этого же условия с использованием распределения (1) получим

$$E_0 = \frac{kT}{q} \alpha \frac{1}{1 + \frac{n_0}{\Delta p(0)}} .$$
 (6)

Формула (5) нами использовалась для вычисления  $E_0$ , а формула (6) - для вычисления  $\alpha$ .

## 3. Экспериментальные результаты

Для определения основных параметров, характеризующих работу диода при произвольных уровнях инжекции, нами измерялись ВАХ и дифференциальное активное сопротивление двух промышленных диодов - Д219А и Д223Б.

Геометрические размеры диодов брались из нашей работы [2]. Избыточная концентрация дырок вычислялась по формуле

$$\Delta p(0) = \frac{n_i^2}{n_0} e^{\frac{qU_{p-n}}{kT}} , \qquad (7)$$

где *пi* - собственная концентрация электронов в кремнии, *U*<sub>*p*-*n*</sub> - напряжение на *p*-*n* переходе:

$$U_{p-n} = U_d - U_b, \qquad (8)$$

Здесь $U_d\,$  - напряжение на диоде,  $U_b\,$  - падение напряжения на базе диода. $U_b\,$ определялось графически по формуле

$$U_{b} = \int_{0}^{I} r_{b}(I) dI , \qquad (9)$$

где  $r_b(I) = r_d - r_{p-n}$  - дифференциальное сопротивление базы,  $r_d$  – измеренное дифференциальное сопротивление диода, а дифференциальное сопротивление p-n перехода берется в виде

$$r_{p-n} = \frac{kT}{qI} \quad . \tag{10}$$

Формула (5) позволяет определить ток, при котором напряженность поля вдоль базы постоянна, из условия

$$\frac{b\frac{n_0}{\Delta p(0)}}{2 + \frac{n_0}{\Delta p(0)}} = 1.$$

При этом токе имеем

$$E_0 = E_\infty = \frac{U_b}{W} \quad , \tag{11}$$

где W- длина базы диода. Из (11) при известном значении  $n_0$  (которое определялось из измерений барьерной емкости) довольно просто вычисляется подвижность электронов  $\mu_n$  -1286 см<sup>2</sup>/В(сек для Д223Б и 1330 см<sup>2</sup>/В·сек для Д219А).

На рис.1 представлены вычисленные зависимости электрического поля от координаты *х* при трех уровнях инжекции для диода Д223Б.



Рис.1. Зависимости электрического поля от координаты x при трех уровнях инжекции для диода Д223Б: 1 -  $\Delta p(0)/n_0 = 0.31$ , 2 -  $\Delta p(0)/n_0 == 0.8$ , 3 (  $\Delta p(0)/n_0 = 1.52$ . Кривая 2 соответствует току, при котором вычисляется подвижность.

Отметим, что для определения подвижности и диффузионной длины используются формулы (5) и (6), относящиеся к границе *p*-*n* перехода при *x*=0, поэтому зависимость параметра  $\alpha$  от *x* не должна влиять на точность определения этих параметров. Может иметь место ошибка в определении параметра  $\alpha$  при высоких уровнях инжекции из-за неточности определения дифференциального сопротивления *p*-*n* перехода по формуле (10).

Таким образом, показано, что полупроводниковый диод с *p-n* переходом можно использовать как для определения концентрации свободных носителей в базе диода (из измерений барьерной емкости), так и для определения их подвижности (при учете особенностей распределения электрического поля в базе диода).

# ЛИТЕРАТУРА

- 1. Э.И.Адирович, А.И.Губкин, Б.Д.Копыловский. ФТТ, **4**, 1853 (1962).
- 2. А.Г.Алексанян, Н.С.Арамян, Р.К.Казарян. Изв. АН АрмССР, Физика, 25, №1, 36 (1990).
- 3. В.В.Тогатов, П.А.Гнатюк. ФТП, **39**, 378 (2005).
- 4. **И.П.Степаненко**. Основы теории транзисторов и транзисторных схем. М., Энергоиздат, 1977.
- 5. С.Зи. Физика полупроводниковых приборов. В 2-х книгах. М., Мир, 1984.
- 6. А.А.Лебедев, А.А.Лебедев, Д.В.Давыдов. ФТП, 34, 113 (2000).
- 7. В.И.Стафеев. ЖТФ, 28, 1631 (1958).
- 8. С.П.Синица. Радиотехника и электроника, 7, 1427 (1962).

# ԷԼԵԿՏՐԱԿԱՆ ԴԱՇՏԻ ԲԱՇԽՈՒՄԸ ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴՃԱՅԻՆ *p-n* ԱՆՑՈՒՄՈՎ ԴԻՈԴԻ ԲԱԶԱՅՈՒՄ

# Ն.Ս. ԱՐԱՄՅԱՆ

Կիսահաղորդչային *p-n* անցումով դիօդի համար ստացված է արտահայտություն բազայում էլեկտրական դաշտի բաշխման համար, որը կիրառելի է ինժեկցիայի ցանկացած մակարդակի դեպքում։ ծույց է տրված, որ դիօդի որոշակի հոսանքի դեպքում դաշտը բազայի երկարությամբ հաստատուն է, ինչը թույլ է տալիս որոշել հիմնական լիցքատարների շարժունակությունը (խտությունը որոշվում է փակոցայինի ունակության չափումներից)։ Արդյունաբերական Д223ը և Д219Ը դիօդների համար չափված են ՎԱԲ և դիֆերենցիալ դիմադրությունը և հաշվարկված են էլեկտրոնների շարժունակությունները։ Բերված է էլեկտրական դաշտի բաշխումը Ժ223ը դիօդի համար ինժեկցիայի երեք մակարդակների դեպքում։

# ELECTRIC FIELD DISTRIBUTION IN THE BASE OF A SEMICONDUCTOR p-n JUNCTION DIODE

## N.S. ARAMYAN

The electric field distribution in the base of a semiconductor p-n junction diode is obtained, which is valid at arbtrary injection levels, in the exponential distribution approximation for nonequilibrium carriers in the diode base. It is shown that at a certain current the field across the base is constant, which allows one to determine the mobility of majority carriers (the carrier density is determined from barrier capacity measurements). Current-voltage characteristics and differential resistance for commercial diodes D223B and D219A are measured and the mobility of electrons is calculated. The distribution of the electric field for D223B diode is calculated at three injection levels.

УДК 533.9

# ОНДУЛЯТОР С ПОСТОЯННЫМИ МАГНИТАМИ ИЗ ФЕРРИМАГНЕТИКОВ

# М.Л. ПЕТРОСЯН, Л.А. ГАБРИЕЛЯН, Ю.Р. НАЗАРЯН, Г.Х. ТОВМАСЯН, К.Б. ОГАНЕСЯН

#### Ереванский физический институт

(Поступила в редакцию 20 марта 2006 г.)

Создан ондулятор для терагерцового ЛСЭ из ферритовых материалов. Длина периода ондулятора составляет 9 см, число периодов – 27. С помощью подбора и перераспределения магнитных элементов удалось снизить разброс по амплитудам магнитного поля до 7%. Использованы дополнительные обмотки на магнитных элементах для компенсации остаточного разброса. Необходимый фокусирующий градиент магнитного поля получается за счет относительного смещения вдоль оси *х* чередующихся полюсов с противоположным знаком магнитного поля. Исследованы параметры ондулятора, в том числе и фокусирующие свойства в горизонтальной плоскости.

## 1. Введение

По способу создания магнитного поля ондуляторы можно разделить на электромагнитные (в том числе сверхпроводящие) и на постоянных магнитах. Каждый из этих видов имеет свои преимущества и недостатки. В [1] приводятся результаты численных расчетов для различных ондуляторных схем, выполненных с помощью трехмерного магнитостатического кода RADIA. Для каждого типа ондуляторов было найдено максимально достижимое магнитное поле как функция отношения зазора к периоду ондулятора.

В последние годы наибольший интерес и широкое распространение как с точки зрения максимального достигаемого магнитного поля, так и простоты и компактности конструкции, представляют ондуляторы на постоянных редкоземельных магнитах. Однако эти магниты очень дороги, труднообрабатываемы и имеют значительный разброс параметров. В данной работе приводится описание ондулятора, в котором применены более дешевые ферритовые магниты. Ондуляторный магнит предусмотрен для использования в проекте A820 МНТЦ, выполняемом в ЕрФИ [2].

# 2. Конструкция ондулятора

В магнитных ондуляторах стараются получить наиболее высокое значение коэффициента ондуляторности

$$k = \frac{eB_0\lambda_U}{2\pi nc^2} = 0.943 \cdot \lambda_U [\text{cm}] \cdot B_0 [\text{T}], \qquad (1)$$

где  $\lambda_U$  – длина периода ондулятора,  $B_0$  – амплитуда магнитного поля ондулятора. Так как в классическом ондуляторном излучении  $k \sim 1$ , то выбор величины магнитного поля зависит от величины  $\lambda_U$ . При коротких длинах периода ондулятора требуются высокие значения магнитного поля и используются либо электромагниты, либо постоянные магниты из редкоземельных элементов.

При создании ондуляторов для ЛСЭ в терагерцовой области длина периода ондулятора составляет порядка 10 см, и, следовательно, потребуется магнитное поле порядка 1000 Э. Поэтому стало возможным использование самых дешевых и широко распространенных магнитов из ферритовых материалов. Использовались постоянные магниты марки 22БА220. Длина периода ондулятора составляет 9 см, число периодов – 27. Ширина магнитов составляет 6 см, высота – 2 см.

Предварительные расчеты показали, что для получения необходимой амплитуды магнитного поля ондулятора не менее 0,1 Т достаточно, чтобы длина магнитов составляла 2,7 см. Однако при таких размерах магнитных пластин вид кривой распределения магнитного поля был далек от синусоидального. После более точных расчетов, произведенных с помощью программы FEMLAB-3.1, было получено, что для синусоидального распределения магнитного поля длину магнитов следует выбрать равной 3,2 см. Распределение магнитного поля по длине одного периода приведено на рис.1.



Рис.1. Распределение магнитного поля по длине одного периода (черная линия – по центру ондулятора, серая – вблизи полюсов).

#### 3. Сортировка магнитов

Центральной задачей при создании ондулятора было достижение одинаковой амплитуды магнитного поля во всех периодах ондулятора.

Одним из основных недостатков конструкции ондулятора на постоянных магнитах является большой разброс магнитной индукции в разных магнитных элементах. Результаты исследования разброса величины магнитной индукции для всех элементов показали, что первоначальный разброс параметров составляет 40%, и дальнейшее применение таких элементов является невозможным без применения специальных мер.

Для уменьшения разброса был произведен подбор магнитных элементов с разбросом величины магнитной индукции в диапазоне 18%, при этом отбраковалось 20% магнитных элементов.

Для приравнивания амплитуд магнитного поля всех периодов применялось два метода. Во-первых, с помощью подбора и перераспределения магнитных элементов удалось снизить разброс по амплитудам магнитного поля до 7%. Во-вторых, использовались дополнительные обмотки на магнитных элементах для компенсации остаточного разброса. Проведенные измерения показали, что с помощью относительно малых обмоток с плотностью тока 3 А/мм<sup>2</sup> возможно достигнуть хорошей компенсации ((3%).

#### 4. Фокусировка пучка в ондуляторе

Широко используемые плоские ондуляторы создают естественную фокусировку электронного пучка только в одном вертикальном направлении *у*. При генерации электромагнитного излучения в миллиметровом диапазоне длин волн используются заметно расходящиеся электронные пучки низкой энергии. В связи с этим требуется эффективная фокусировка в обоих поперечных направлениях *х* и *у*.

Согласно работе [3], волновые числа колебаний пучка по всем трем направлениям *x*, *y* и *z* удовлетворяют условию

$$k_x^2 + k_y^2 = k_U^2 , (2)$$

где

$$k_x = \sqrt{\frac{eq}{\gamma nc^2}}, \qquad k_U = \frac{2\pi}{\lambda_U}$$
(3)

есть бетатронное волновое число квадрупольной фокусировки в горизонтальной плоскости (*q* – сила квадрупольной фокусировки).

Из формулы (2) следует, что, добавляя фокусировку в горизонтальной плоскости, мы тем самым уменьшаем на такую же величину вертикальную (естественную) фокусировку. Обычно стараются получить равную фокусировку, когда выполняется условие  $k_x = k_y = k_U / 2$ . Таким образом, градиент поля по горизонтали будет

$$q = k_x^2 \gamma mc^2 / e = 1.12 \cdot 15 \cdot 9.1 \cdot 10^{-28} \cdot 9 \cdot 10^{20} / 4.8 \cdot 10^{-10} = 272 \ \Gamma c/cm.$$
(4)

Различные авторы предлагали несколько схем ондуляторов, магнитные поля которых могли бы фокусировать электронный пучок. Фокусирующий градиент магнитного поля  $B_y(x)$  получается за счет относительного смещения вдоль оси x чередующихся полюсов с противоположным знаком магнитного поля. На краях магнитного зазора возникает преобладание амплитуд магнитного поля одного знака и, следовательно, появляется необхо-

димый профиль  $B_y(x)$ . На рис.2 приведены результаты измерения и расчета распределения магнитного поля ондулятора в горизонтальном направлении. Из результатов видно, что линейная область с градиентом (300 Гс/см составляет порядка 1 см с центром, смещенным от центра магнитного элемента на 2 см. При этом поле в центре выбранной области уменьшается на 20%. При выборе этого варианта магнитные элементы ставятся смещенными на 2 см от центра ондулятора.



Рис.2. Горизонтальное распределение магнитного поля ондулятора. Круглые значки – результаты измерения, прямоугольные – рассчитанные с помощью FEMLAB.

#### 5. Измерение параметров ондулятора

Для настройки магнитных элементов ондулятора, помимо распределения магнитного поля, важно знать первый и второй интегралы магнитного поля вдоль оси ондулятора, которые определяют угол и координату *х* выхода пучка из ондулятора [4].

Использование импульсного проволочного метода для быстрого измерения магнитных полей ондуляторов было предложено в [4]. Этот метод применялся и в некоторых других работах [5-7]. Была создана аналогичная установка для измерения магнитных характеристик ондулятора. Схема этой установки представлена на рис.3. Основным элементом установки является тонкая проволока, натянутая вдоль оси ондулятора. С одной стороны проволока закрепляется на неподвижной опоре, а с другой – перебрасывается через ролик и натягивается с помощью груза. По проволоке периодически пропускается импульс тока *I*. В проволоке образуется область возмущения, которая начинает распространяться по проволоке в прямом и обратном направлениях с акустической скоростью

$$v = \sqrt{T/P} \sim 300 \text{ m/c} , \qquad (5)$$

где Т – сила натяжения нити, Р – линейная плотность материала нити.



магнитного поля ондулятора.

Сигнал на выходе датчика отклонения проволоки будет пропорционален первому интегралу магнитного поля (при использовании короткого импульса тока) или второму интегралу магнитного поля (при использовании длинного импульса тока).

Амплитуда колебаний проволоки для случая короткого импульса тока имеет вид [6]:

$$A_1 = \frac{I_{01}\Delta t B_0 \lambda_U}{4\pi P_V} \quad , \tag{6}$$

где  $L_{1}$  – величина тока в проволоке,  $\Delta t$  – длительность импульса.

Для наблюдения второго интеграла магнитного поля требуется более длинный импульс тока. За время этого импульса акустическая волна должна успеть пройти весь ондулятор, т.е. должно быть выполнено условие

$$\Delta t v > L_{oud}$$
,  $\tau.e.$   $\Delta t > (L_{oud}/v)$ . (7)

При работе с ондуляторами длиной 270 см (при скорости акустической волны 300 м/с) длительность импульса тока составляет 10 мс. Амплитуда колебаний проволоки для случая длинного импульса тока равна

$$A_2 = \frac{I_{02}B_0\lambda_U^2}{8\pi^2 T} \ . \tag{8}$$

В частности, амплитуда колебаний равна нескольким миллиметрам при амплитуде импульса тока 1.5 А.

Исследовалось поперечное отклонение проволоки с током для выяснения фокусируещего свойства ондулятора в горизонтальной плоскости. Результаты приведены на рис.4.



Длина ондулятора

Рис.4. Поперечное отклонение проволоки с током в ондуляторе. Сплошные кривые – при обычном расположении магнитных элементов в ряд. Пунктирные кривые – при смещении магнитов на 1 см от центральной линии.

Как показано на рис.4, имеет место достаточно хорошая фокусировка в горизонтальной плоскости.

В заключение авторы выражают благадарность Ю.А.Гарибяну, М.К.Оганесяну и М.А.Акопову за помощь в изготовлении ондулятора.

#### ЛИТЕРАТУРА

- P.Elleaume, O.Chubar, J.Chavanne. «Computing 3D Magnetic Field from Insertion Devices». Proceedings of the 1997 Particle Accelerator Conference 188 (PAC97), May 1997, pp.3509-3511.
- 2. Free Electron Laser Without Inversion. Проект МНТЦ А820.
- 3. E.T.Scharlemann. J. Appl. Phys., 58, 2154 (1985).
- 4. **R.W.Warren**. "Limitations on the use of the pulsed-wire field measuring technique", NIM, **A272**, 257 (1988).
- 5. R.Prown, K.Halbach, J.Harris, H.Winick. NIM, 208, 65 (1983).
- 6. **С.В.Толмачев**. "Экспериментальные исследования по созданию специальных ондуляторов для лазеров на свободных электронах и лазерных ускорителей". Диссертация на соискание ученой степени канд. физ.-мат. наук. Москва, 2004.
- 7. **B.J.A.Shepherd, J.A.Clarke**. "Magnetic Design of a Focusing Undulator for ALPHA-X". Proceedings of EPAC-2004, Lucerne, Switzerland.

# UNDULATOR WITH FERRIMAGNETIC PERMANENT MAGNETS

# M.L. PETROSYAN, L.A. GABRIELYAN, Y.R. NAZARYAN, G.Kh. TOVMASYAN, K.B. HOVHANNISYAN

The terahertz FEL ferrimagnetic permanent magnet undulator is created. The length of the undulator period is 9 cm, number of the periods is 27. By means of selection and redistribution of magnetic elements it is possible to lower the spread of amplitudes of the magnetic field up to 7 %. Additional windings on magnetic elements were used for indemnification of residual disorder. The needed focusing gradient of a magnetic field is obtained due to relative displacement of alternating poles with an opposite sign of a magnetic field along the *x*-axis. The undulator parameters, including focusing properties in the horizontal plane, are investigated.

# ԲՈՎԱՆԴԱԿՈՒԹՅՈՒՆ

# CONTENTS

H.H.Adamyan, T.V.Gevorgyan, G.Yu.Kryuchkyan. Ergodicity in computer modeling of quantum dissipative systems.	3
D.M.Sedrakian, P.G.Petrosyan, L.N.Grigoryan, V.D.Badalyan. Investigation of the temperature coefficient of the forbidden band energy of CdSe <sub>1-x</sub> S <sub>x</sub> semiconductor	
nanostructures	9
L.N.Ananikian. Magnetic properties of <sup>3</sup> He on the recursive lattices	17
E.M.Harutyunyan, S.H.Harutyunyan, A.H.Gevorgyan. Optical properties of gyro-	
tropic crystals in an ultrasound field. II. Natural polarizations and eigenvalues	24
A.Kh.Manaselyan, A.A.Kirakosyan. Mobility of charge carriers with position	
dependent effective mass in a quantum film.	34
L.S.Bezhanova, Z.V.Baghdasaryan, M.L.Baburyan. Influence of the molecular structure of components on the induction of mesophases in nematic liquid crystal	
systems	43
N.S.Aramyan. Electric field distribution in the base of semiconductor p-n junction	
diode	51
M.L.Petrosyan, L.A.Gabrielyan, Y.R.Nazaryan, G.Kh.Tovmasyan, K.B.Hovhannisyan. Undulator with ferrimagnetic permanent magnets.	
	57

# СОДЕРЖАНИЕ

А.О.Адамян, Т.В.Геворгян, Г.Ю.Крючкян. Эргодичность в компьютер-	
ном моделировании квантовых диссипативных процесов	3
Д.М.Седракян, П.Г.Петросян, Л.Н.Григорян, В.Д.Бадалян. Исследование температурного коэффициента энергии запрещенной зоны полу-	
проводниковых наноструктур CdSe <sub>1.x</sub> S <sub>x</sub>	9
Л.Н.Ананикян. Магнитные свойства <sup>3</sup> Не на рекурсивных решетках	17
Э.М.Арутюнян, С.О.Арутюнян, А.А.Геворгян. Оптические свойства гиро- тропных кристаллов в ультразвуковом поле. II. Собственные поля-	
ризации и собственные значения	24
А.Х.Манаселян, А.А.Киракосян. Подвижность носителей заряда с зави-	
сящей от положения эффективной массой в квантовой пленке	34
Л.С.Бежанова, З.В.Багдасарян, М.Л.Бабурян. Влияние молекулярной структуры компонентов на индуцирование мезофаз в нематических	
жидкокристаллических системах	43
Н.С.Арамян. Распределение электрического поля в базе полупроводни-	51
	21
м.л.петросян, л.А.Гаориелян, Ю.Р.Назарян, Г.А.Говмасян, К.Б.Огане-	
сян. Ондулятор с постоянными магнитами из ферримагнетиков	57

Тираж 150. Сдано в набор 27.10.2006. Подписано к печати 02.11.2006. Печ. л. 4. Бумага офсетная. Цена договорная. Типография НАН РА. 375019, Ереван, пр. Маршала Баграмяна, 24.