

ISSN 0002-3035

ՓԻՅԻԿԱ · ՖԻԶԻԿԱ · PHYSICS



ИЗВЕСТИЯ
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК АРМЕНИИ

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ
ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ

PROCEEDINGS
OF NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF ARMENIA

42, N3, 2007

ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ՀԱՆՐԱՊԵՏՈՒԹՅԱՆ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱ
НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК РЕСПУБЛИКИ АРМЕНИЯ

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ ИЗВЕСТИЯ
ՖԻԶԻԿԱ ФИЗИКА

ՀԱՏՈՐ ԾՈՄ

42

№ 3

ԵՐԵՎԱՆ

ЕРЕВАН

2007

© Национальная Академия наук Армении
Известия НАН Армении, Физика

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

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

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

ԽՄԲԱԳՐԱԿԱՆ ԿՈՆԵԳԻԱ

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

EDITORIAL BOARD

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

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

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

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

УДК 537.86

ФОРМИРОВАНИЕ СПЕКТРА ИЗЛУЧЕНИЯ ПРИ ПЛОСКОСТНОМ КАНАЛИРОВАНИИ СГУСТКА ПОЗИТРОНОВ С УЧЕТОМ НЕОДНОРОДНОСТИ СРЕДЫ

Л.А. ГЕВОРГЯН, Л.А. ОВСЕПЯН

Ереванский физический институт

(Поступила в редакцию 2 февраля 2007 г.)

Исследовано излучение позитрона в плоскостном канале кристалла с учетом зависимости поляризации среды от поперечной координаты. Получено выражение для спектрального распределения числа излученных фотонов единичным позитроном. В крайне мягкой и жесткой областях из-за поляризации среды не все позитроны участвуют в формировании излучения. С учетом этого получена аналитическая формула для суммарного спектрального распределения числа фотонов.

1. Введение

В работах [1,2] было показано, что поляризация среды может существенно изменить спектральные характеристики излучения одномерного осциллятора: в частности, появляется энергетический порог излучения, вблизи которого имеет место эффект сужения спектра. Гинзбургом было предложено использовать излучение одномерных осцилляторов для получения микрорадиоволн [3]. Излучение в жесткой области частот в ондуляторе без учета поляризации среды было исследовано Корхмазяном [4], а при каналировании в кристалле – Кумаховым [5]. В эксперименте [6] был получен спектр числа жестких фотонов, излученных при плоскостном каналировании позитронного пучка.

В настоящей работе развита теория излучения релятивистского позитрона при плоскостном каналировании с учетом поляризации среды, зависящей от поперечной координаты. Получена расчетная формула спектрального распределения числа фотонов излучения при плоскостном каналировании позитронного сгустка. При этом оказывается, что число мягких фотонов излучения сравнимо с числом жестких фотонов.

2. Траектории позитронов при плоскостном каналировании

Пусть релятивистский позитронный сгусток с малой угловой расходимостью и энергией $E = m_0 c^2 \gamma$ ($\gamma \gg 1$), где γ – Лоренц-фактор, $m_0 c^2$ – энергия покоя частицы, падает параллельно в плоскостной канал монокристалла. Задачу об излучении при каналировании заряженных частиц в кристалле можно рассматривать в рамках классической электродинамики, если энергии излучаемых фотонов $\hbar\omega \ll E$, где ω – частота фотона.

Для усредненного потенциала канала (перпендикулярного оси Y) выберем

параболический модельный потенциал, который хорошо описывает плоскостное каналирование позитронов [5]:

$$U(y) = U_0 \left(\frac{2}{d} y \right)^2, \quad (1)$$

где U_0 – глубина потенциальной ямы, y – поперечная координата, d – межплоскостное расстояние. Напишем уравнение движения релятивистской частицы:

$$\frac{d^2 y}{dt^2} + (\Omega_{Ch}^2 t) y = 0, \quad (2)$$

где

$$\Omega_{Ch} = \frac{\Omega_0}{\sqrt{\gamma}}, \quad \Omega_0 = \frac{2c\sqrt{2v}}{d}, \quad v = \frac{U_0}{mc^2}. \quad (3)$$

Здесь Ω_0 – собственная частота плоскостного канала кристалла, зависящая от параметров канала U_0 и d , а Ω_{Ch} – частота колебаний позитрона в кристалле, зависящая также от энергии позитрона.

Уравнению (2) удовлетворяют синусоидальные траектории позитронов. Поскольку позитроны сгустка имеют нулевую поперечную энергию, то в канале они попадают на вершину синусоидальных траекторий:

$$y(t) = \frac{d}{2} s \cos(\Omega_{Ch} t), \quad (4)$$

где s – начальные поперечные координаты позитронов в единицах $d/2$ (центру канала соответствует $s = 0$). Таким образом, позитроны осциллируют в канале с одинаковой частотой, но с разными амплитудами.

Угол Линдхарда, при котором еще имеет место явление каналирования, равен максимальному углу отклонения позитрона ($s = 1$) от продольного направления Z :

$$\vartheta_L = \sqrt{2v/\gamma}. \quad (5)$$

При плоскостном каналировании с возрастанием энергии частота колебаний, а также угол Линдхарда обратно пропорциональны $\sqrt{\gamma}$. Следовательно, при увеличении энергии позитрона его пространственный период колебаний в канале увеличивается:

$$l_{Ch} = l_0 \sqrt{\gamma}, \quad l_0 = \pi d / \sqrt{2v}. \quad (6)$$

Однако амплитуда колебаний (интенсивность излучения) зависит от начальной поперечной координаты позитрона. Поэтому позитроны сгустка вносят различный вклад в суммарное излучение.

3. Зависимость поляризации среды от поперечной координаты канала

Поляризация среды определяется плотностью электронов (плазменной частотой), которые в атомной оболочке распределены неравномерно. При рассмотрении эффекта каналирования истинный потенциал заменяется усредненным, поэтому истинное распределение электронов естественно заменить усредненной плотностью, зависящей только от поперечной координаты.

Для нахождения распределения средней электронной плотности атомов кристалла воспользуемся уравнением статической модели Томаса–Ферми для потенциала поля объемных зарядов в атоме φ и уравнением Пуассона, определяющим этот потенциал посредством непрерывной электронной плотности $\rho(r)$:

$$\frac{d^2\varphi}{dr^2} = \frac{\varphi^{3/2}}{\sqrt{r}} = -4\pi\rho(r), \quad (7)$$

где $\rho(r)$ зависит от расстояния r в поперечном направлении. Здесь r – расстояние от ядра в единицах радиуса атома $r_A = 0.885a_0/z^{1/3}$, где z – заряд ядра, а $a_0 = 0.529 \times 10^{-8} \text{Å}$ – первый борковский радиус атома водорода. С другой стороны, функция $\varphi(r)$ связана с потенциалом $V(r)$ следующим соотношением:

$$\varphi(r) = \frac{\mu}{Ze} rV(r). \quad (8)$$

Учитывая (7), получаем следующую связь между электронной плотностью и потенциалом атома:

$$\rho(r) \sim rV^{3/2}(r). \quad (9)$$

Усредним выражение (9) по продольным координатам канала. Используя параболический потенциал (1) и связь $r = (1-s)/a$, где $a = 2r_A/d$, получаем следующую зависимость электронной плотности от поперечной координаты s :

$$\rho(s) = \rho_A(s) + \rho_0, \quad \rho_A(s) = 20\rho_A(1-s)(s-b)^3 h(1-s)h(s-b)/a^4, \quad (10)$$

где ρ_A – средняя плотность электронов в атоме, а ρ_0 – вне атома, $b=1-a$, функция Хевисайда $h(s)$ равна единице при $s > 0$ и равна нулю при $s \leq 0$. Распределение $\rho_A(s)$ принимает свое максимальное значение $\rho_m = (135/64)\rho_A$ при $s_m = 1-a/4$. Средняя электронная плотность в атоме ρ_A в $1/a$ раза больше средней плотности по кристаллу ρ_{cryst} .

Определим поляризацию среды в канале через электронную плотность. Используя зависимость плазменной частоты $\omega_0(s) = 2c\sqrt{\pi r_0 \rho(s)}$ от $\rho(s)$, где $r_0 = 2,82(10^{-13} \text{ см})$ – классический радиус электрона, для поляризации $\eta(s)$ имеем:

$$\eta(s) = \frac{I}{\gamma} \left(\frac{\omega_0(s)}{\Omega_0} \right)^2 = \frac{\pi r_0 \rho(s)}{2\mu} d^2, \quad \mu = v\gamma. \quad (11)$$

Отметим, что поляризация среды уменьшается с увеличением энергии пучка. С учетом (10) для максимального значения поляризации имеем $\eta_m = \eta_A(s_m) = (135/64)\eta_A$, $s_m = 1-a/4$, $\eta_A = \eta_{\text{cryst}}/a$, где η_A – среднее значение поляризации среды в атоме, а η_{cryst} – ее среднее значение по кристаллу.

На рис.1 приведено распределение электронной плотности и поляризации среды в канале (110) кристалла алмаза с $U_0 = 25 \text{ эВ}$, $d = 1.26 \text{E}$ [7], $a \approx 0.4$, $\rho_{\text{cryst}} \approx 10^{24} \text{ см}^{-3}$ и $\eta_{\text{cryst}} = 1.85 \times 10^{-4}$ при энергии позитрона $A = 4 \text{ ГэВ}$.

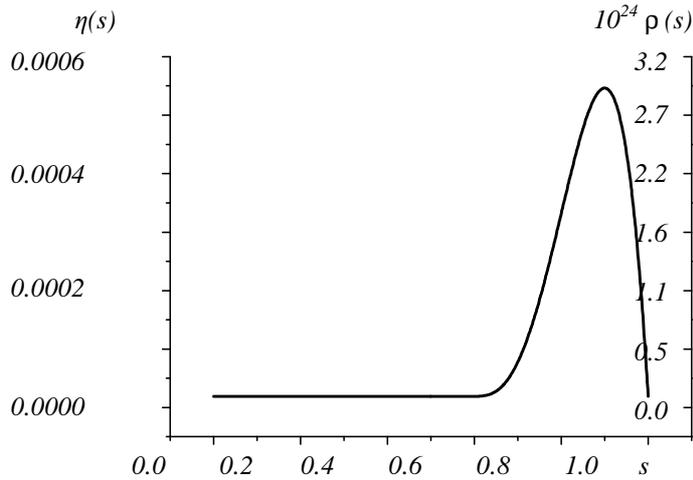


Рис.1. Зависимость электронной плотности ($\rho(s)$ в канале (110) кристалла алмаза и поляризации среды $\eta(s)$ от расстояния от центра канала при энергии позитронов $E = 4$ ГэВ.

4. Спектр числа фотонов, излученных каналированным позитроном с учетом поляризации среды

Используем формулу (32) работы [2] для частотно-углового распределения излучения основной гармоники одномерного осциллятора в среде. В этой формуле закон сохранения энергии-импульса при многократных осцилляциях выражается наличием δ -функции:

$$\delta(\theta^2 - 1/x + Q + \eta(s)/4x^2), \quad Q = 1 + q^2/2, \quad q = s\sqrt{2v\gamma}, \quad (12)$$

где θ – полярный угол излучения в единицах $1/\gamma$, $x = \omega/2\Omega_0\gamma^{3/2}$ – отношение частоты ω к максимальной частоте излучения под нулевым углом, q – параметр осцилляций позитрона с начальной поперечной координатой s , функция $\eta(s)$ характеризует поляризацию среды на расстоянии $sd/2$ от середины канала.

Для спектрального распределения числа фотонов излучения имеем:

$$\frac{dN_{ph}}{dx} = \frac{\pi\alpha n}{2} q^2 (1 + G^2(x, \eta(s))), \quad G(x, \eta(s)) = 2Qx - 1 + \frac{\eta(s)}{2x}, \quad (13)$$

где $n = L/l_{Ch} = L/l_0\sqrt{\gamma}$ – число периодов колебаний позитрона в канале на длине L , $\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137$ – постоянная тонкой структуры.

Частотный интервал излучения определяется из условия (12), где $\theta^2 \geq 0$:

$$\frac{1 - \sqrt{1 - \eta(1 + \mu s^2)}}{2(1 + \mu s^2)} \leq x \leq \frac{1 + \sqrt{1 - \eta(1 + \mu s^2)}}{2(1 + \mu s^2)}. \quad (14)$$

Отметим, что с увеличением амплитуды колебаний $sd/2$ частотный интервал излучения сужается. В реальных случаях η – малая величина порядка $1/\gamma$. Следовательно, частотный

интервал можно представить в виде

$$\eta(s)/4 \leq x \leq I/(I + \mu s^2). \quad (15)$$

Спектральное распределение (13) получено для диспергирующей среды в области частот $\omega \in \omega_0(s)$, где диэлектрическая проницаемость представляется выражением $\varepsilon(\omega) = I - \omega_0^2(s)/\omega^2$. Следовательно, частотная область (15) ограничена снизу условием $\sqrt{x_I}/\gamma \leq x_0 \leq x$, где $x_I = (\eta_0 + \eta_m)/4$. С другой стороны, $x_0 = \eta_0/4$, поэтому фоновое значение поляризации η_0 должно удовлетворять условию $\sqrt{\eta_m}/2\gamma \ll \eta_0 \ll \eta_m$.

Спектральное распределение излучения в мягкой области частот ($x_0 \leq x \leq I$) ранее не исследовалось. Как следует из (15), в интервале (x_0, x) излучение формируется не всеми позитронами. На данной частоте x излучают только позитроны с начальными поперечными координатами s , удовлетворяющими условию

$$\eta(s) \leq 4x. \quad (16)$$

Исследуем уравнение

$$\eta(\lambda) = k\lambda^3(a - \lambda) = 4x, \quad (17)$$

где $\lambda = s - b$, $k = 4(4/a)^4(x_I - x_0)/27$. Оно имеет два действительных положительных решения:

$$\lambda_{\mp}(x) = \frac{a}{4}(I + \sqrt{I + y}) \left[I \mp \sqrt{I - \frac{2y}{\sqrt{I + y}(I + \sqrt{I + y})}} \right], \quad (18)$$

где

$$y = \frac{3}{2} \left(\frac{x - x_0}{x_I - x_0} \right)^{1/3} \left[\left(I + \sqrt{I - \frac{x - x_0}{x_I - x_0}} \right)^{1/3} + \left(I - \sqrt{I - \frac{x - x_0}{x_I - x_0}} \right)^{1/3} \right].$$

При этом решение $\lambda_-(x)$ в интервале $x_0 \leq x \leq x_I$ возрастает: $0 \leq \lambda_-(x) \leq 3a/4$, а $\lambda_+(x)$ убывает: $a \geq \lambda_+(x) \geq 3a/4$. Из (19) и (20) следует, что на частоте x излучают позитроны с амплитудами колебаний $s < s_-(x)$ и $s_+(x) \leq s$.

Как видно из рис.2, спектр числа мягких фотонов на частоте x обогащается излучением всех позитронов сгустка.

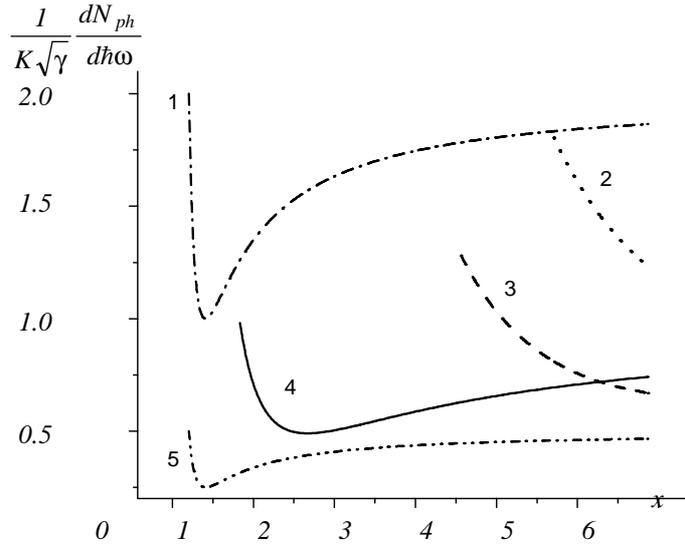


Рис 2. Частотное распределение числа мягких фотонов в области частот (ω, x_1) , излученных позитронами с энергией 4 ГэВ в плоскостном канале (110) кристалла алмаза. Через s обозначены начальные координаты позитронов в единицах $d/2$: 1 – $s = 1$, 2 – $s = 0.95$, 3 – $s = 0.8$, 4 – $s = 0.7$, 5 – $s = 0.5$.

5. Спектр числа фотонов излучения при каналировании позитронного сгустка

Пусть электроны в канале распределены следующим образом: в интервале $(b \leq s \leq c)$ p имеет зависимость (10), а в интервалах $(0 \leq s \leq b)$ и $(c \leq s \leq 1)$ $p = p_0$, где $c = a + b$. Для получения суммарного спектра числа излученных фотонов при плоскостном каналировании сгустка, состоящего из N_+ позитронов, необходимо формулу (13) усреднить по равномерному распределению начальных поперечных координат s :

$$\frac{dN_{ph}^{bunch}}{dx} = N_+ K \sqrt{\gamma} F, \quad K = \pi \alpha \frac{L}{l_0} v, \quad F(x, s, \eta(s)) = \langle s^2 (1 + G^2(x, \eta(s))) \rangle. \quad (19)$$

В интервале (ω, x_1) на частоте x вносят вклад только те позитроны сгустка, амплитуды колебаний которых находятся в интервалах $0 < s < s_-(x)$ и $s_+(x) < s < 1$. В диапазоне частот (x_1, x_2) , где $x_2 = 1/(1 + \mu)$, спектр формируется всеми каналированными позитронами. В интервале $(x_2, 1)$ на частоте x вносят вклад только позитроны с начальными поперечными координатами $s \leq s(x) = \sqrt{(1-x)/\mu x}$. После усреднения формулы получаем сумму полиномов $F_0(s) + F_A(s)$ по степеням s , где $F_0(s) = F(x, s, 0)$, а $F_A(s) = F(x, s, A(s))$. При этом $F_A(s)$ отлично от нуля в интервале $1/(1 + \mu c^2) = x_c \leq x \leq x_b = 1/(1 + \mu b^2)$. С учетом вышесказанного суммарный спектр числа фотонов имеет следующий вид:

$$\frac{dN_{ph}^{bunch}}{dx} = N_+ K \sqrt{\gamma} F(x), \quad (20)$$

$$\begin{aligned}
F = & h(x-x_0)h(x_1-x)\left[F_0(l)-F_0(s_+)+F_0(s_-)+F_A(c)-F_A(s_+)+F_A(s_-)-F_A(b)\right]+ \\
& +h(x-x_1)h(x_2-x)\left[F_0(l)+F_A(c)-F_A(b)\right]+h(x-x_2)h(x_c-x)F_0(s)+ \\
& +h(x-x_c)h(x_b-x)\left[F_0(s(x))+F_A(s(x))\right]+h(x-x_b)h(l-x)F_0(s(x)).
\end{aligned}$$

Однако удобнее суммарный спектр рассчитать численным методом, с учетом зависящего от s ограничения на частоту излучения (15).

6. Заключение

Дана теория излучения при плоскостном каналировании позитронного сгустка с учетом неоднородной поляризации среды канала. При этом максимумы спектральных распределений смещаются к центру спектра. Показано, что суммарный спектр слабо зависит от частоты излучения. Однако спектр имеет три максимума: в крайне мягкой, мягкой и жесткой областях частот. Для практического применения пригоден весь широкий диапазон спектра.

ЛИТЕРАТУРА

1. **L.A.Gevorgian, N.A.Korkhmazian.** Hard undulator radiation in a dispersive medium. Preprint YFI-273(66)-77, 1977; Phys. Lett. A, **74**, 453 (1979).
2. **Л.А.Геворгян, Н.А.Корхмазян.** ЖЭТФ, **76**, 1226 (1979).
3. **В.Л.Гинзбург.** Изв. АН СССР, сер. Физ., **11**, 165 (1947).
4. **Н.А.Корхмазян.** Изв. АН АрмССР, Физика, **5**, 287 (1970).
5. **М.А.Кутакхов.** Phys. Lett. A, **57**, 17 (1976).
6. **Р.Авакян, И.Мирошниченко, Д.Мюррэй, Т.Фигут.** ЖЭТФ, **82**, 1825 (1982).
7. **В.А.Базылев, Н.К.Жеваго.** Излучение быстрых частиц в среде и во внешних полях. М., Наука, 1987.

RADIATION SPECTRUM FORMATION AT THE PLANAR CHANNELING OF A POSITRON BUNCH WITH ALLOWANCE FOR THE MEDIUM INHOMOGENEITY

L.A. GEVORGIAN, L.A. HOVSEPYAN

The radiation of a positron in a planar channel of a crystal is studied, considering the dependence of the medium polarization on the transverse coordinate. The expression for the spectral distribution of the number to radiated photons is obtained for a single positron. It is shown that because of the medium polarization in the soft and hard regions not all positrons make a contribution to the radiation formation. The analytic formula for the total spectral distribution of the number of photons is obtained.

УДК 537.86

РАСЧЕТ СПЕКТРА ФОТОНОВ, ИЗЛУЧЕННЫХ ПРИ ПЛОСКОСТНОМ КАНАЛИРОВАНИИ ПОЗИТРОННОГО СГУСТКА, С УЧЕТОМ ПОЛЯРИЗАЦИИ СРЕДЫ

Л.А. ОВСЕПЯН

Ереванский физический институт

(Поступила в редакцию 7 февраля 2007 г.)

Проведен численный расчет спектра излучения позитронного сгустка с энергией $E = mc^2\gamma = 4$ ГэВ в канале (110) монокристалла алмаза с учетом неоднородной поляризации среды. Найдены особенности спектра в крайне мягкой области частот. Характеристики расчетного спектра согласуются с экспериментальными данными, полученными в жесткой области частот.

Рассматривается задача об излучении позитронного сгустка, параллельно падающего в плоскостной канал с непрерывным параболическим потенциалом с глубиной $U_0 = vmc^2$. Тогда начальные поперечные координаты позитронов являются амплитудами их синусоидальных колебаний. Среда в канале предполагается неоднородной со следующим распределением поляризации:

$$\eta(s) = k(1-s)(s-b)^3 h(1-s)h(s-b) + \eta_0. \quad (1)$$

Заметим, что поляризация связана с плотностью электронов $\rho(s)$ выражением $\eta(s) = \pi r_0 \rho(s) d^2 / 2v\gamma$ и убывает с увеличением энергии позитронов. Здесь s – начальная поперечная координата позитрона в единицах полуширины канала $d/2$ (s отсчитывается от середины канала), $h(s)$ – функция Хевисайда. Вне области $(b;1)$ поляризация имеет только фоновое значение $\eta_0 \ll \eta_A$ (η_A – среднее значение поляризации в области атома), l_0 – классический радиус электрона, $k = 20\eta_A / a^4$, $a = 1-b = 2r_A/d$, где r_A – радиус атома. Свое максимальное значение поляризация принимает при $s_m = 1 - a/4$: $\eta_m = \eta(s_m) = \eta_0 + 27k/64$. Отметим, что в реальных случаях $\eta_m \ll 1$.

Используем спектральное распределение фотонов, излученных основной гармоникой на длине плоскостного канала L позитроном, движущимся по бесконечной синусоидальной траектории с амплитудой s [1]:

$$dN_{ph}^{bunch} / dx = \Gamma f(x, s), \quad \Gamma = \alpha v L \sqrt{2v\gamma} / d, \quad f(x, s) = s^2 \left[1 + \left(2x - l + 2v\gamma x s^2 + \eta(s) / 2x \right)^2 \right], \quad (2)$$

где $x = \omega / \omega_b$ – энергия фотона $\hbar\omega$ в единицах максимального значения энергии жестких фотонов $\hbar\omega_b$, излученных под нулевым углом. Интервал излучаемых частот также зависит от амплитуды колебаний s .

$$\eta(s)/4 \leq x(s) \leq 1/(1+v\gamma s^2). \quad (3)$$

При этом нижний предел частоты определяется поляризацией среды, а верхний – параметрами канала и энергией позитрона. В области частот $\eta_m/4 = x_m^{soft} \leq x \leq x_m^{hard} = 1/(1+v\gamma)$ вносят вклад все каналированные позитроны сгустка. Отметим, что x_m^{soft} – минимальная частота излучения позитрона с амплитудой колебаний s_m , а x_m^{hard} – максимальная частота при амплитуде $s=1$. Вне этого частотного интервала число позитронов сгустка, вносящих вклад в излучение, уменьшается. Поэтому максимумы спектра приходятся на эти частоты.

Поперечные координаты позитронов сгустка в канале распределены равномерно. Для нахождения спектра излучения необходимо усреднить (2) по s . В данной работе это усреднение проведено численным моделированием. Для позитрона с амплитудой s определяется $\eta(s)$ и для частот, удовлетворяющих условию (3), рассчитывается число излученных фотонов. Суммируя полученные спектры по всем возможным s и разделив на число рассмотренных траекторий, получаем среднее спектральное распределение на один каналированный позитрон сгустка.

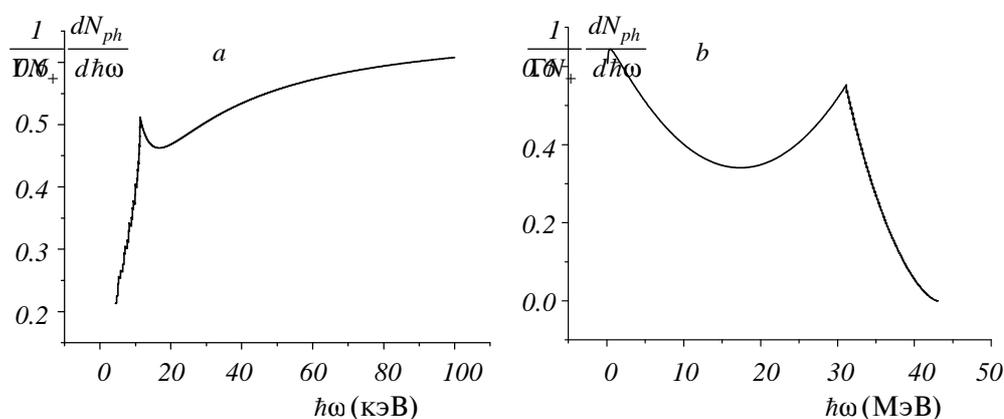


Рис.1. Спектр числа фотонов излучения, приходящихся на единичный позитрон сгустка с энергией 4 ГэВ и N_+ частицами в канале (110) монокристалла алмаза в мягкой (а) и жесткой (б) областях спектра.

Для канала (110) монокристалла алмаза межплоскостное расстояние $d=1.26 \times 10^{-8}$ см, глубина потенциальной ямы $U_0 \approx 25$ эВ ($v=4.87 \times 10^{-5}$) [2], средняя плотность электронов в кристалле алмаза $\rho_c \approx 10^{24}$ см $^{-3}$. В области полуканала с шириной a имеем $\rho_A \approx \rho_c/a = 2.5 \times 10^{24}$ см $^{-3}$, так как $a=0.4$ (радиус атома алмаза $r_A=2.5 \times 10^{-8}$ см), $\eta_m=9.75 \times 10^{-4}$, а для фоновой поляризации среды выберем $\eta_0=8 \times 10^{-5} \approx \eta_m$. Тогда $x_m^{soft}=2.6 \times 10^{-4}$, а $x_m^{hard}=0.72$ при энергии $E=4$ ГэВ ($\gamma=7828$). Для максимальной энергии фотонов $\hbar\omega_b=2\hbar\Omega_{Ch}\gamma^2$, где $\Omega_{Ch}=2c\sqrt{2v}/(d\sqrt{\gamma})$ – частота колебания позитронов в канале, получаем $\hbar\omega_b \approx 43$ МэВ ($x=1$). Следовательно, в максимуме спектра в жесткой области для энергии фотонов имеем $43(\text{кэВ})/(1+v\gamma) = 31$ МэВ, что удовлетворительно согласуется со значением 27 МэВ, полученным в эксперименте [3]. Для энергии фотонов, соответствующей максимуму спектра в мягкой области,

получаем $43(\text{МэВ}) x_m^{\text{soft}} = 11$ кэВ. Результаты расчета приведены на рис.1.

Таким образом, в работе проведен численный расчет спектра излучения позитронного сгустка в плоскостном канале, где плотность электронов имеет неоднородное распределение. Неоднородность среды приводит к изменению спектрального распределения числа излученных фотонов. Спектр имеет три максимума: в крайне мягкой, мягкой и жесткой областях частот. Сравнение полученных характеристик спектра в жесткой области с экспериментальными данными дает удовлетворительное согласие.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л.А.Геворгян, Л.А.Овсепян. Изв. НАН Армении, Физика, **42**, 131 (2007)
2. В.А.Базылев, Н.К.Жеваго. Излучение быстрых частиц в среде и во внешних полях. М., Наука, 1987.
3. Р.Авакян, И.Мирошниченко, Д.Мюррэй, Т.Фигут. ЖЭТФ, **82**, 1825 (1982).

ՀԱՐԹՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐՈՎ ՈՒՂՂՈՐԴՎԱԾ ՊՈԶԻՏՐՈՆԱՅԻՆ ԹԱՆՁՐՈՒՅԹԻ ՃԱՌԱԳԱՅԹԱԾ ՖՈՏՈՆՆԵՐԻ ՍՊԵԿՏՐԻ ՀԱՇՎԱՐԿԸ ՄԻՋԱՎԱՅՐԻ ԲԵՎԵՌԱՑՄԱՆ ՀԱՇՎԱՌՄԱՄԲ

Լ.Ա. ՀՈՎՍԵՓՅԱՆ

Աշխատանքում կատարված է արմաստի միաբյուրեղի (110) հարթություններով ուղղորդված $E=mc^2\gamma=4$ ԳէՎ էներգիայով պոզիտրոնային փնջի ճառագայթած ֆոտոնների սպեկտրի հաշվարկը միջավայրի բևեռացման հաշվառմամբ: Բացահայտված են սպեկտրի առանձնահատկությունները հաճախությունների փափուկ տիրույթի եզրում: Ստացված արդյունքները համեմատվում են կոշտ տիրույթում դիտարկված փորձարարական տվյալների հետ:

CALCULATION OF THE PHOTON SPECTRUM RADIATED BY A PLANARLY CHANNELED POSITRON BUNCH WITH ALLOWANCE FOR THE MEDIUM POLARIZATION

L.A. HOVSEPYAN

The spectrum of photons radiated by 4 GeV energy positrons bunch channeled in diamond monocrystal planes (110) is calculated, considering the medium polarization. The spectrum characteristics in the boundary soft region are obtained. The results are compared with experimental data, which was observed in the hard frequency region.

УДК 539.1

ТЕОРИЯ АДИАБАТИЧЕСКОГО ИЗМЕНЕНИЯ КРИТИЧЕСКОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ БОЗЕ-ЭЙНШТЕЙНОВСКОЙ КОНДЕНСАЦИИ ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА В ОПТИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ

Г.А. МУРАДЯН, А.Ж. МУРАДЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 6 декабря 2006 г.)

Вычислена критическая температура бозе-эйнштейновской конденсации идеального бозе-газа при наличии внешнего периодического потенциала, в одном, двух или трех направлениях. Ряд сделанных приближений дает возможность показать, что единственным параметром, определяющим критическую температуру конденсации, является ширина нижней энергетической зоны с прямой пропорциональностью одной третьей степени этой ширины для каждого направления периодичности внешнего потенциала. Тем самым доказывается и ранее полученный с помощью численных расчетов результат о том, что углубление периодического потенциала (приводящее, как известно, к сужению энергетических зон) приводит к понижению критической температуры. Подчеркнута основополагающая роль квантового туннелирования в установлении этой закономерности.

1. Введение

Сверхохлажденный газ в бозе-эйнштейновском конденсированном состоянии обладает рядом уникальных свойств, благодаря которым он стал предметом исследований очень широкого фронта [1]. Интерес как с фундаментально-научной, так и с прикладной точек зрения, обусловлен в первую очередь макроскопическим характером волновой функции для конденсированного состояния вещества, а именно, тем, что пространственно-временная эволюция всего конденсата описывается одной квантовомеханической волновой функцией.

В настоящее время сверхохлажденные газы локализируются и удерживаются в определенной части пространства исключительно с помощью внешних полей. Расчеты показывают, что наличие этих потенциалов пленения существенно влияет и на характеристики конденсата, в частности, на значение температуры перехода газа из нормального в бозе-конденсированное состояние, ниже которой в газе начинается установление когерентности макроскопических размеров. Нелишне здесь отметить, что именно предсказанный рост критической температуры плененного газа относительно свободного состояния сделал возможным получение конденсированного состояния с помощью техники испарительного охлаждения и метода лазерного охлаждения чуть более десяти лет тому назад. Критическая температура конденсации (T_c), однако, не всегда повышается при наличии внешнего потенциала. В работе [2] было показано, что если внешнее поле является строго периодическим в пространстве, то T_c не увеличивается, а уменьшается относительно значения свободного состояния, причем при асимптотическом углублении потенциала

температура T_c стремится к нулю. Результат был получен на основе численных расчетов, но физического объяснения такому поведению не было дано. Понижение температуры в области относительно больших глубин периодического потенциала, созданного стоячей волной лазерного излучения вне линий поглощения, было наблюдаемо и экспериментально [3]. В дальнейшем нам удалось [4], исходя из поведения расстояния между низколежащими энергетическими уровнями поступательного движения атома, дать наглядную физическую интерпретацию зависимости температуры T_c идеального газа от параметров внешнего потенциала пленения. В случае строго периодического потенциала эту роль, естественно, берут на себя ширины низколежащих энергетических зон, расстояния между ними и в первую очередь ширина наинизшей зоны.

В настоящей работе мы идем дальше. Используя некоторые не очень жесткие математические приближения, мы выводим явное выражение для температуры T_c как функции от параметров системы. Оно, во-первых, обосновывает физические соображения [4] о поведении температуры T_c при адиабатически медленном изменении глубины внешнего пространственно-периодического потенциала и конкретизирует вид этого поведения. При этом впервые будут последовательно рассмотрены и случаи, когда в трехмерном пространстве периодические потенциалы создаются в двух взаимно-ортогональных направлениях (одно остается свободным) или во всех трех сразу. Во-вторых, полученные окончательные формулы настолько просты, что совсем нетрудно будет, мы надеемся, проверить их и на эксперименте. Следует добавить к сказанному, что на практике пространственно-периодические потенциалы легко создаются и называются оптическими решетками. С положением вещей в этой стремительно развивающейся отрасли на стыке атомной, лазерной и статистической физики можно ознакомиться, например, в [5].

2. Статфизическая задача идеального газа в поле одномерно-, двумерно- или трехмерно-периодического потенциала

Воздействие на поступательное движение атомов и молекул оптическими полями лазерного излучения представляется как результат обмена импульсом при поглощении и излучении фотонов. Это означает, что эволюция состояния поступательного движения атома (молекулы) неразрывно связано с эволюцией внутренних характеристик и понятие потенциала для движения центра тяжести атома (молекулы) в общем случае не является строго определяемой величиной. В условиях отсутствия спонтанных процессов релаксации между энергетическими уровнями атома оказывается возможным ввести некий аналог потенциала для каждого внутреннего энергетического состояния, возмущаемого внешним электромагнитным полем. Отсюда следует важное для рассматриваемого круга задач следствие: если атом почти все время взаимодействия будет находиться на одном из внутренних энергетических уровней (например, на основном), что равносильно предположению об исключительно виртуальном характере квантовых переходов из этого состояния в другие внутренние состояния и между последними, то потенциал для указанного внутреннего энергетического уровня выступит и как потенциал для центра тяжести всего атома. Эти условия на практике реализуются очень просто. Достаточно частоту лазерного излучения выбрать далеко от основной линии (или группы линий) атомного поглощения, чтобы обеспечить виртуальность переходов, но так, чтобы не занулить вероятности виртуальных переходов и тем самым глубину потенциала взаимодействия. (Количественные характеристики для формулировки этих условий можно найти в любом учебнике по лазерной фи-

зике и спектроскопии.) В рамках данной статьи мы будем рассматривать именно "однопотенциальный" случай. Кроме того, будем считать, что при наличии стоячих волн в двух или трех направлениях созданные ими потенциалы для поступательного движения атома просто складываются.

Основополагающее соотношение статистической механики большого канонического ансамбля, связывающее химический потенциал μ с числом частиц (атомов) N в системе и с объемом V [6], в рассматриваемых условиях может быть записано в виде

$$\frac{k^3 V}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dP_X \int_{-\infty}^{\infty} dP_Y \int_{-\infty}^{\infty} dP_Z \frac{1}{\exp \left[\frac{\varepsilon_X(P_X) + \varepsilon_Y(P_Y) + \varepsilon_Z(P_Z) - \mu}{\kappa_B T} \right]} = N, \quad (1)$$

где P_j ($j = X, Y, Z$) – импульс (или квазиимпульс) центра тяжести атома. Для удобства расчетов все входящие в интегралы величины представлены в безразмерной форме; импульс (квазиимпульс) нормирован на импульс отдачи $2\hbar k$, где k – волновой вектор каждой из встречных волн, образующих стоячую волну, а химический потенциал μ , энергии $\varepsilon_j(P_j)$ и тепловая энергия $\kappa_B T$ нормированы на энергию отдачи $E_r = (2\hbar k)^2 / 2M$, где M – масса атома. Например, при свободном движении имеем дисперсионную связь $\varepsilon(P) = P^2$. Формула (1) предполагает также расширенное представление дисперсионной связи энергия–квазиимпульс.

А. Случай одномерного периодического потенциала. Интегралы по двум свободным направлениям вычисляются элементарно и мы получаем

$$-2 \frac{k^3 V \kappa_B T}{\pi^2} \int_0^{\infty} dP \ln \left\{ 1 - \exp \left[\frac{\mu - \varepsilon(P)}{\kappa_B T} \right] \right\} = N. \quad (2)$$

Интегрирование по квазиимпульсам представим теперь как сумму интегралов по бриллюэновским зонам (индексом суммирования будет m) и одновременно разложим логарифм в сходящийся ряд Тейлора относительно экспоненты (индексом суммирования будет n). Меняя далее последовательность суммирований с интегрированием, будем иметь

$$2 \frac{k^3 V \kappa_B T}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \exp \left(n \frac{\mu}{\kappa_B T} \right) \sum_{m=1}^{\infty} \int_{(m-1)/2}^{m/2} dP \exp \left[-n \frac{\varepsilon(P)}{\kappa_B T} \right] = N. \quad (3)$$

Сконцентрируем внимание на интегральном члене и представим дисперсионное соотношение, например, для бипараболической формы периодического потенциала:

$$\cos(2\pi P) = 1 + 2G_{11}(\varepsilon)G_{22}(\varepsilon) \quad (4)$$

(явные выражения функций $G_{11}(\varepsilon)$ и $G_{22}(\varepsilon)$ нет необходимости приводить; их можно найти в [2]).

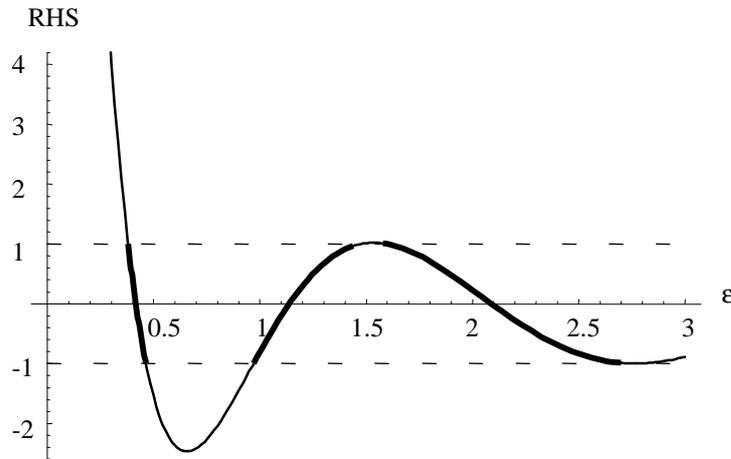


Рис.1. Зависимость правой стороны соотношения (4) от нормированной энергии ε , когда глубина потенциала равна энергии отдачи E . Жирные линии соответствуют разрешенным зонам энергии.

Характерной особенностью соотношений типа (4), как хорошо известно из теории периодических систем, является то, что не все действительные значения ε удовлетворяют этому соотношению, а лишь так называемые разрешенные. Нелишне напомнить процедуру определения этих значений, поскольку она будет использована для построения нашего приближения. На рис.1 представлена правая сторона (right-hand side – RHS) соотношения (4) как функция от ε . Соотношению (4) удовлетворяют и потому физический смысл энергии имеют те значения ε на оси абсцисс, для которых значения ординат находятся в пределах от -1 до $+1$ (эти участки показаны жирными линиями). Как видно, они заполняют некую последовательность областей, которые известны как разрешенные энергетические зоны. В основном соотношении (3) функция $\varepsilon(P)$ задается графиками внутри разрешенных зон, где функциональная зависимость относительно проста. Сильно искривленные области графика находятся вне энергетических зон, не имеют физического смысла и поэтому не присутствуют в соотношении (3). Конкретизируем также, что в интеграл во внутренней сумме с $m = 1$ входит кусок $\varepsilon(P)$ из первой зоны, с $m = 2$ – из второй зоны и т.д. Обратим теперь внимание на то, что зависимость $\varepsilon(P)$ в первой зоне почти линейна, а в более высоких зонах отклонения от линейности монотонно увеличиваются, но не очень быстро. Наше приближение для вычисления этих интегралов заключается в замене указанной (P -зависимости в пределах каждой зоны прямой линией. При этом мы исходим из того, что усиление отхода от линейной зависимости $\varepsilon(P)$ сопровождается достаточно быстрым (экспоненциальным) уменьшением вклада соответствующих им членов в соотношении (4), что является прямым следствием предположения о состоянии теплового равновесия газа.

Если крайние значения энергии в m -ой зоне обозначить через $\varepsilon_{\min}^{(m)}$ и $\varepsilon_{\max}^{(m)}$, то после указанной линейаризации дисперсионное соотношение (4) запишется в виде

$$\varepsilon(P) = \frac{\varepsilon_{\max}^{(m)} + \varepsilon_{\min}^{(m)}}{2} + (-1)^m \frac{\varepsilon_{\max}^{(m)} - \varepsilon_{\min}^{(m)}}{2} \cos(2\pi P), \quad (5)$$

а интеграл в (3) вычисляется, выражаясь модифицированной функцией Бесселя нулевого порядка $I_0(x)$ с экспоненциальным предмножителем. В результате мы приходим к новому, более простому виду для основного статфизического соотношения:

$$\frac{k^3 V \kappa_B T_c}{\pi^2} \sum_{m=1}^{\infty} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \exp\left(-n \frac{\bar{\varepsilon}^{(m)} - \varepsilon_{\min}^{(1)}}{\kappa_B T_c}\right) I_0\left(n \frac{\delta^{(m)}}{2\kappa_B T_c}\right) \right) = N, \quad (6)$$

где через $\bar{\varepsilon}^{(m)} = (\varepsilon_{\max}^{(m)} + \varepsilon_{\min}^{(m)})/2$ обозначено среднее значение энергии в m -ой зоне, а через $\delta^{(m)} = \varepsilon_{\max}^{(m)} - \varepsilon_{\min}^{(m)}$ – ширина этой зоны. Вклад каждой энергетической зоны в это выражение определяется уже одномерным рядом, что очень удобно для численных расчетов. Тем не менее следует специально остановиться на вопросе сходимости этого ряда. Как хорошо известно из теории, ряд от $1/n$ (что является первым множителем в рассматриваемом ряде) расходится, но любое, сколь угодно малое усиление этого закона погашения делает ряд сходящимся. Химический потенциал, который входит во второй, экспоненциальный множитель, по определению не может превосходить минимальное значение энергетического спектра, то есть заведомо $\mu < \bar{\varepsilon}^{(m)}$ для всех m , и следующий множитель экспоненциально затухает при росте n . Поэтому для окончательного выяснения вопроса следует обратиться к асимптотическому виду модифицированной функции Бесселя при больших значениях аргумента:

$$I_0\left(n \frac{\delta^{(m)}}{2\kappa_B T_c}\right) \approx \frac{\sqrt{2\kappa_B T_c}}{\sqrt{2\pi n \delta^{(m)}}} \exp\left(n \frac{\delta^{(m)}}{2\kappa_B T_c}\right), \quad (7)$$

реализующемуся при больших, простирающихся до бесконечности значений n . Это означает, что асимптотическое поведение упомянутой суммы определяется видом

$$\sum_{\text{large } n} \frac{1}{n^{3/2}} \exp\left[-\frac{n}{\kappa_B T_c} (\varepsilon_{\min}^{(m)} - \mu)\right]. \quad (8)$$

А эта сумма, очевидно, сходится для любого физически допустимого значения $\mu \leq \varepsilon_{\min}^{(m)}$. Таким образом, соотношение (6) является корректно определенным с математической точки зрения и удобным видом для вычисления функциональной зависимости μ от T с любой, наперед заданной точностью. В частности, критическая температура будет определяться подстановкой крайнего значения $\mu = \varepsilon_{\min}^{(1)}$:

$$\frac{k^3 V \kappa_B T_c}{\pi^2} \sum_{m=1}^{\infty} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \exp\left(-n \frac{\bar{\varepsilon}^{(m)} - \varepsilon_{\min}^{(1)}}{\kappa_B T_c}\right) I_0\left(n \frac{\delta^{(m)}}{2\kappa_B T_c}\right) \right) = N. \quad (9)$$

Из общих принципов теории бозе-эйнштейновской конденсации [6] прямо следует, что для температур ниже критической, $T < T_c$, в соотношении (6) под N следует понимать не полное число атомов, а лишь неконденсированных ($N \rightarrow N_{\text{nc}}$), подставляя при этом значение химического потенциала $\mu = \varepsilon_{\min}^{(1)}$, соответствующее критической температуре. Число конденсированных атомов, естественно, вычисляется вычитанием N_{nc} из общего числа N : $N_c = N - N_{\text{nc}}$.

Вернемся теперь к формуле (7) и используем ее уже не для обоснования сходимости ряда, а для замены (6) приближенным, еще более простым видом. Действительно, формула (7) может быть использована и для малых значений l , начиная с $l = 1$, если, во-первых, $\kappa_B T \ll \delta^{(1)}/2$, т.е. если тепловая энергия атома существенно меньше полуширины первой, наиболее узкой энергетической зоны (вблизи критической температуры и даже ниже это условие хорошо выполняется для экспериментов [7], проводимых с лазерными стоячими волнами оптического диапазона). Выполнение этого условия все же необязательно и приближенный расчет суммы по l можно провести с использованием (7) и тогда, когда вклад первых членов суммы, для которых еще не выполнено условие $n\delta^{(m)}/2\kappa_B T \gg 1$, оказывается малым. Не вдаваясь в подробности, отметим только, что для вышеуказанной замены вполне достаточно выполнение условия

$$\frac{\pi^2 N}{k^3 V \kappa_B T} > \frac{2\kappa_B T}{\delta^{(m)}}. \quad (10)$$

После подстановки (7) в (6) ряд по l вычисляется, выражаясь через вырожденную гипергеометрическую функцию $\Phi(a, 3/2; 1)$, и мы получаем основное статфизическое соотношение в более простом виде:

$$\frac{k^3 V}{\pi^{5/2}} (\kappa_B T) \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{\delta^{(m)}}} \exp\left(-\frac{\epsilon_{\min}^{(m)} - \mu}{\kappa_B T}\right) \Phi\left(e^{-(\epsilon_{\min}^{(m)} - \mu)/\kappa_B T}, \frac{3}{2}; 1\right) = N. \quad (11)$$

Критическая температура из него определяется, как и раньше, заменой $\mu = \epsilon_{\min}^{(1)}$. Примечательным в этом выражении является то, что населенности энергетических зон входят в виде отдельных слагаемых с левой стороны. Это означает, в частности, что если ограничиться однозонным приближением (сохранить только член с $m = 1$), что хорошо выполняется в широком классе экспериментов по БЭК в оптических решетках [7], то получим элементарное соотношение для T_c . Чтобы сделать более наглядным его вид, целесообразно ввести понятие первой энергетической зоны для (почти) свободного газа, то есть в пределе, когда зоны, расширяясь, примыкают друг к другу у бриллюэновских границ квазиимпульсов. Если ширину этой зоны обозначить через $\delta_{\text{free gas}}^{(1)}$ (в нормированных единицах она равна 1/4), а критическую температуру свободного идеального газа [6] – через T_c^0 , то она запишется в виде

$$T_c = \left(\frac{\pi}{2}\right)^{2/3} \left[\frac{\delta^{(1)}}{\delta_{\text{free gas}}^{(1)}}\right]^{1/3} T_c^0. \quad (12)$$

Эта формула, которая является одним из основных результатов данной работы, не только обосновывает ранее полученный из физических соображений результат [4] о том, что при увеличении глубины периодического потенциала критическая температура падает, так как ширина энергетической зоны $\delta^{(1)}$ уменьшается с углублением потенциала, но и показывает, что это уменьшение происходит по очень простому закону: пропорционально одной третьей степени ширины первой зоны.

Приближенный характер формулы (12) можно увидеть в том, что при переходе к пределу свободного газа $\delta^{(1)} \rightarrow \delta_{\text{free gas}}^{(1)}$ критическая температура T_c стремится не к T_c^0 , а к $(\pi/2)^{2/3} \approx 1.35$ раза большему значению. Основным из сделанных приближений для области неглубоких потенциалов (глубина в единицах энергии отдачи меньше единицы) является замена дисперсион-

ных кривых прямыми линиями для низколежащих энергетических зон (см. рис.1). С углублением потенциала (уменьшением $\delta^{(m)}$) роль этой причины уменьшается (дисперсионные кривые выпрямляются, начиная с первой энергетической зоны). Увеличивается роль использования асимптотической формулы (7), так как для больших первых членов требуется для нее условие $n\delta^{(m)}/2\kappa_B T \gg 1$ не выполняется. Внесенная ошибка однозонного приближения для сверхохлажденных газов в любом случае остается малой.

Б. Случаи двумерного и трехмерного периодических потенциалов. Пусть двумерный (трехмерный) периодический потенциал есть сумма двух (трех) периодических потенциалов, каждый из которых является периодическим только в одном из декартовых направлений. Тогда схема расчетов не претерпевает никаких качественных изменений, и мы можем сразу представить окончательные результаты. Основное статфизическое соотношение, например, вместо (6) будет иметь вид

$$\frac{k^3 V \sqrt{\kappa_B T}}{\pi^{5/2}} \sum_{m,m'=1}^{\infty} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n}} \exp\left(n \frac{\mu - \bar{\epsilon}^{(m,X)} - \bar{\epsilon}^{(m',Y)}}{\kappa_B T} \right) I_0\left(n \frac{\delta^{(m,X)}}{2\kappa_B T} \right) I_0\left(n \frac{\delta^{(m',Y)}}{2\kappa_B T} \right) \right) = N$$

для двумерного случая и

$$\frac{k^3 V}{\pi^3} \sum_{m,m',m''=1}^{\infty} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \exp\left(n \frac{\mu - \bar{\epsilon}^{(m,X)} - \bar{\epsilon}^{(m',Y)} - \bar{\epsilon}^{(m'',Z)}}{\kappa_B T} \right) I_0\left(n \frac{\delta^{(m,X)}}{2\kappa_B T} \right) I_0\left(n \frac{\delta^{(m',Y)}}{2\kappa_B T} \right) I_0\left(n \frac{\delta^{(m'',Z)}}{2\kappa_B T} \right) \right) = N$$

для трехмерного случая. После применения (7) они упрощаются и принимают, соответственно, вид

$$\frac{k^3 V}{\pi^{7/2}} (\kappa_B T)^{3/2} \sum_{m,m'=1}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{\delta^{(m)} \delta^{(m')}}} \exp\left(-\frac{\epsilon_{\min}^{(m)} + \epsilon_{\min}^{(m')} - \mu}{\kappa_B T} \right) \Phi\left(e^{-(\epsilon_{\min}^{(m)} + \epsilon_{\min}^{(m')} - \mu)/\kappa_B T}, \frac{3}{2}; 1 \right) = N$$

и

$$\frac{k^3 V}{\pi^{9/2}} (\kappa_B T)^{3/2} \sum_{m,m',m''=1}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{\delta^{(m)} \delta^{(m')} \delta^{(m'')}}} \exp\left(-\frac{\epsilon_{\min}^{(m)} + \epsilon_{\min}^{(m')} + \epsilon_{\min}^{(m'')} - \mu}{\kappa_B T} \right) \times \\ \times \Phi\left(e^{-(\epsilon_{\min}^{(m)} + \epsilon_{\min}^{(m')} + \epsilon_{\min}^{(m'')} - \mu)/\kappa_B T}, \frac{3}{2}; 1 \right) = N,$$

откуда в однозональном для каждого направления периодического потенциала приближении следуют такие же элементарные выражения для критической температуры через ширины зон, как и (12), а именно:

$$T_c \approx \left(\frac{\pi}{2} \right)^{4/3} \left[\frac{\delta^{(1,X)}}{\delta_{\text{free gas}}^{(1)}} \right]^{1/3} \left[\frac{\delta^{(1,Y)}}{\delta_{\text{free gas}}^{(1)}} \right]^{1/3} T_c^0 \quad (13)$$

для потенциалов с двумерной, и

$$T_c \approx \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \left[\frac{\delta^{(1,X)}}{\delta_{\text{free gas}}^{(1)}} \right]^{1/3} \left[\frac{\delta^{(1,Y)}}{\delta_{\text{free gas}}^{(1)}} \right]^{1/3} \left[\frac{\delta^{(1,Z)}}{\delta_{\text{free gas}}^{(1)}} \right]^{1/3} T_c^0 \quad (14)$$

для потенциалов с трехмерной периодичностью.

3. Заключение

Формулы (12)-(14) представляют основные результаты данной работы. Они показывают, что в достаточно хорошем приближении ширина первой энергетической зоны является единственным параметром, определяющим критическую температуру бозе-эйнштейновской конденсации идеального газа в поле периодического потенциала. Из блоховской теории периодического потенциала хорошо известно, что углубление потенциала быстро сужает энергетические зоны, особенно первую. Поэтому даже в условиях пропорциональности одной третьей степени ширины зоны в случае одномерно-периодического потенциала (согласно формуле (12)-углубление потенциала до $2\div 3E$ оказывается достаточным для понижения критической температуры в два раза. Сопоставление этих формул показывает также, что в однозонном приближении каждое направление периодичности действует как бы независимо, убыстряя тем самым темп зависимости критической температуры от глубины потенциала, когда его периодичность переходит от одномерного к двумерному и трехмерному, соответственно.

Зонная структура разрешенных и запрещенных значений энергии является, как хорошо известно, следствием периодичности пространственного распределения потенциала и соответствующего ей блоховского характера стационарных волновых функций, простирающихся вдоль всего потенциала равномерно. Для представляющих интерес состояний, энергии которых меньше высоты потенциала, блоховские состояния реализуются исключительно квантовым туннелированием через периодический ряд потенциальных барьеров. Тем самым можно сделать заключение об исключительной роли явления туннелирования в полученной закономерности поведения критической температуры БЭК при изменении потенциала. Если исключить возможность туннелирования для квантовых частиц (атомов в нашем случае), то каждый низкоэнергичный атом остался бы захваченным и локализованным только в одной ямообразной области потенциала, как это бывает, например, для гармонического потенциала. Энергетический спектр поступательного движения атома оказался бы дискретным, причем эти уровни удалились бы при углублении потенциала и привели бы к хорошо известному для изолированных ям повышению критической температуры, что было бы прямо противоположно полученному выше.

Один из авторов (А.Ж.М.) благодарит Х.Меткалфа, М.Касевича и участников семинаров их групп за полезные обсуждения результатов. Работа выполнена в рамках тематической программы 0126 МОиН Армении.

ЛИТЕРАТУРА

1. Bose-Einstein condensation in atomic gases, ed. by **M.Inguscio, S.Stringari, C.Wieman**, IOS Press, Amsterdam 1999, **J.R.Anglin, W.Ketterle**. *Nature*, **416**, 211 (2002), **Y.Castin**, arXiv:cond-mat/0105058; **A.J.Leggett**. *Rev. Mod. Phys.*, **73**, 307 (2001), **C.J.Pethick, H.Smith**. *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*. Cambridge, 2004.
2. **А.Ж. Мурадян, Г.Л. Арутюнян**. *Изв. НАН Армении. Физика*, **35**, 3 (2000).
3. **S.Burger, F.S.Cataliotti, C.Fort, P.Maddaloni, F.Minardi, M.Inguscio**. *Europhys. Lett.*, **57**, 1 (2002).
4. **A.Zh.Muradyan, G.A.Muradyan**. arXiv:cond-mat/0302108.
5. **I.Bloch**. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **38**, s629 (2005). **M.K.Oberthaler, R.Abfalther, S.Bernet, J.Schmiedmayer, A.Zeilinger**. *Phys. Rev. Lett.*, **77**, 4980 (1996); **J.L.Cohen, B.Dubetsky, P.R.Berman**. *Phys. Rev. A*, **60**, 4886 (1999); **K.Berg-Sorensen, K.Molmer**. *Phys. Rev. A*, **58**, 1480 (1998); **D.Jaksch, C.Bruder, J.I.Cirac, C.W.Gardiner, P.Zoller**. *Phys. Rev. Lett.*, **81**, 3108 (1998); **S.Burger, F.Cataliotti, C.Fort, F.Minardi, M.Inguscio, M.L.Chiofalo, M.P.Tosi**. *Phys. Rev. Lett.*, **86**, 4447 (2001); **F.S.Cataliotti, S.Burger, C.Fort, P.Maddaloni, F.Minardi, A.Trombettoni, A.Smerzi, M.Inguscio**. *Science*, **293**, 843 (2001); **M.Greiner, O.Mandel, T.Esslinger, T.W.Hansch, I.Bloch**. *Nature*, **415**, 6867 (2002); **S.M.Giampaolo, F.Illuminati, G.Mazzarella, S. De Siena**. *Phys. Rev. A*, **70**, 061601(R) (2004); **P.Messignan, Y.Castin**. arXiv:cond-mat/0604232, **P.B.Blakie, A.-M.Rey, A.Bezett**. arXiv:cond-mat/0608522.
6. **К.Хуанг**. *Статистическая механика*. М., Мир, 1966; **Р.Балеску**. *Равновесная и неравновесная статистическая механика*. М., Мир, 1978.
7. **J.M.Vogels, K.Xu, C.Raman, J.R.Abo-Shaeer, W.Ketterle**. *Phys. Rev. Lett.*, **88**, 060402 (2002); **T.Stuferle, H.Moritz, C.Schori, M.Kuhl, T.Esslinger**. *Phys. Rev. Lett.*, **92**, 130403 (2004); **L.Fallani, L.De Sarlo, J.E.Lye, M.Modugno, R.Saers, C.Fort, M.Inguscio**. *Phys. Rev. Lett.*, **93**, 140406 (2004); **F.Gerbier, A.Widera, S.Fölling, O.Mandel, T.Gericke, I.Bloch**. *Phys. Rev. Lett.*, **95**, 050404 (2005).

ԻՐԵԱԼԱԿԱՆ ԳԱԶԻ ԲՈԶԵ-ԷՅՆՇՏԵՅՆՅԱՆ ԿՈՆԴԵՆՍԱՅԻԱՅԻ ԿՐԻՏԻԿԱԿԱՆ
ՋԵՐՄԱՍՏԻՃԱՆԻ ԱՐԻԱԲԱՏԱՅԻՆ ՓՈՓՈԽՈՒԹՅՈՒՆԸ ՕՊՏԻԿԱԿԱՆ ՑԱՆՅԵՐՈՒՄ

Գ.Ա. ՄՈՒՐԱԴՅԱՆ, Ա.Ժ. ՄՈՒՐԱԴՅԱՆ

Ներկայացված է իդեալական գազի Բոզե-էյնշտեյնյան կոնդենսացիայի կրիտիկական ջերմաստճանի հաշվման սխեմա, երբ գազը գտնվում է միաչափ, երկչափ կամ եռաչափ արտաքին պարբերական պոտենցիալներում: Մասնավորապես ցույց է տրված, որ կրիտիկական ջերմաստճանը որոշող հիմնական պարամետրը ամենացածր էներգիական գոտու լայնությունն է: Ստացված է պարզագույն, գոտու լայնության 1/3 աստիճանին համեմատականության, օրինաչափություն: Ընդգծված է թունելացման դերը կոնդենսատի ձևավորման գործընթացում:

THEORY OF CRITICAL TEMPERATURE ADIABATIC CHANGE
FOR THE BOSE–EINSTEIN CONDENSATION
OF AN IDEAL GAS IN OPTICAL LATTICES

G.A. MURADYAN, A.Zh. MURADYAN

We present a scheme of analytical calculations determining the critical temperature and the number of condensed atoms of the ideal gas Bose–Einstein condensation in external potentials with 1D, 2D or 3D periodicity. In particular, we show that the width of the lowest energy band appears as the main parameter determining the critical temperature of condensation. A very simple, proportional to the $1/3$ degree, regularity for this dependence is obtained. The fundamental role of tunneling in physics of condensate establishment is underscored.

УДК 548.0

ОСОБЕННОСТИ ПОГЛОЩЕНИЯ СВЕТА В ХИРАЛЬНЫХ ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛАХ С БОЛЬШОЙ ЛОКАЛЬНОЙ АНИЗОТРОПИЕЙ

М.З. АРУТЮНЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 11 декабря 2006 г.)

Рассмотрено взаимодействие света со слоем хирального фотонного кристалла. Изучены особенности эффекта Бормана при большой анизотропии. Исследованы собственные поляризации (СП) и показано, что если в пределе ($\delta = (\epsilon_1 - \epsilon_2)/(\epsilon_1 + \epsilon_2)$ главные значения тензора диэлектрической проницаемости в плоскости, перпендикулярной оси среды) эти поляризации являются ортогональными и квазикруговыми, то в пределе $\delta \gg 1$ они ортогональны, но уже имеют линейную поляризацию. Установлено, что хиральные фотонные кристаллы в общем случае проявляют полную селективность не по отношению к круговым поляризациям (как при $\delta \ll 1$), а по отношению к СП.

1. Введение

В последнее время большой интерес вызывают фотонные кристаллы (ФК) [1,2]. Они составляют особый класс искусственных структур с периодическим изменением диэлектрических свойств в пространственном масштабе порядка оптической длины волны. Такие структуры представляют собой новый тип искусственно создаваемых материалов, обладающих интересными физическими характеристиками, так как их свойства зависят как от физических параметров материалов, из которых они образованы, так и от геометрических размеров слоев и периодов их структур. Такие структуры широко используются в современной интегральной, лазерной и нелинейной оптике, а также в оптоэлектронике. ФК позволяют полностью контролировать распространение световых волн [1-4]. В них наблюдается явление локализации света в дефектных модах с дискретными частотами, лежащими в запрещенных зонах невозмущенного ФК. Особый интерес представляют хиральные ФК (холестерические жидкие кристаллы, хиральные смектики, искусственные хирально-сконструированные кристаллы [5-7] и т.д.) из-за более богатых оптических свойств. Для хиральных ФК фотонная запрещенная зона (ФЗЗ) существует только для света с одной круговой поляризацией (при нормальном падении света), совпадающей со знаком хиральности среды. Здесь селективное по отношению к поляризации дифракционное отражение наблюдается в спектральной области от $\lambda_1 - \sigma l_0$ до $\lambda_2 - \sigma l_e$, где σ – шаг спирали, $n_o = \sqrt{\epsilon_{\square}}$ и $n_e = \sqrt{\epsilon_{\perp}}$ (локальные коэффициенты преломления для обыкновенного и необыкновенного лучей, соответственно).

В ряде работ развита оптика сред со спиральной структурой, которая относится к случаю слабой анизотропии (см., в частности, [8-15], а также ряд других работ, цитируемых в них). В [16-

20] начато построение оптики сред со спиральной структурой с большой (а также огромной) анизотропией. Рассмотрены особенности собственных решений, решена граничная задача для полупространства, изучено влияние диэлектрических границ. Показано, в частности, что хиральные ФК с большой анизотропией теряют свойство селективности по отношению к круговым поляризациям. В данной работе продолжены исследования в этом направлении, а именно, изучены особенности поглощения в таких средах.

Отметим, что большая анизотропия может наблюдаться, например, вблизи отдельных линий поглощения, когда одна из компонент тензора диэлектрической (или магнитной) проницаемости намного больше другой или когда эти компоненты имеют разные знаки. Кроме того, известно [5,6], что спиральные среды можно создать искусственно. Следует ожидать аналогичную ситуацию (т.е. когда $\epsilon > 1$) для искусственных ферромагнитных спиральных структур, имитирующих поведение хиральных ФК в СВЧ области спектра, поскольку, как известно, намагниченные ферромагнетики имеют большую анизотропию в СВЧ области вблизи ферромагнитного резонанса.

2. Основные соотношения

Рассмотрим прохождение и отражение света при его нормальном падении на слой хирального ФК, характеризующегося тензорами диэлектрической и магнитной проницаемостей вида

$$\hat{\epsilon}(z) = \epsilon_m \begin{pmatrix} 1 + \delta \cos 2az & \delta \sin 2az & 0 \\ \delta \sin 2az & 1 - \delta \cos 2az & 0 \\ 0 & 0 & 1 - \delta \end{pmatrix}, \quad \hat{\mu}(z) = \hat{I}, \quad (1)$$

где $\epsilon_m = (\epsilon_1 + \epsilon_2)/2$, $a = 2\pi/\sigma$, σ - шаг спирали, \hat{I} - единичная матрица. Ось спирали среды (ось z) перпендикулярна к граничным поверхностям.

Решение волнового уравнения для хирального ФК, согласно [10,11], имеет вид

$$\mathbf{E}(z, t) = \sum_{j=1}^4 [E_j^+ \mathbf{n}_+ \exp(ik_j^+ z) + E_j^- \mathbf{n}_- \exp(ik_j^- z)] \exp(-i\omega t), \quad (2)$$

где $\mathbf{n}_{\pm} = (\mathbf{x} \pm i\mathbf{y})/\sqrt{2}$ - орты круговых поляризаций, k_j^+ и k_j^- суть z -компоненты волновых векторов: они связаны условием Вульфа(Брэгга) $k_j^+ - k_j^- = 2a$. Аналитическое решение граничной задачи для конечного слоя хирального ФК также известно [13-15]. Представив суммарное поле в среде (2) в виде

$$\mathbf{E}(z) = \mathbf{A}(z) \exp[i(kz - \omega t)], \quad (3)$$

где

$$A_{x,y} = \sqrt{(\operatorname{Re} E_{x,y})^2 + (\operatorname{Im} E_{x,y})^2}, \quad (4)$$

$$k = \operatorname{arctg}(\operatorname{Im} E_x / \operatorname{Re} E_x) / z = \operatorname{arctg}(\operatorname{Im} E_y / \operatorname{Re} E_y) / z,$$

и $E_{x,y}$ суть x, y -компоненты суммарной волны (2), можно определить азимут ψ и эллиптичность e суммарной волны, возникающей в среде:

$$\psi = \frac{1}{2} \operatorname{arctg} \left[\frac{2 \operatorname{Re} \beta}{1 - |\beta|^2} \right], \quad e = \frac{1}{2} \operatorname{arcsin} \left[\frac{2 \operatorname{Im} \beta}{1 + |\beta|^2} \right], \quad (5)$$

где $\beta = E^y / E^x$.

Согласно [13-15], для величины $Q = 1 - (R + T)$ (R и T – энергетические коэффициенты отражения и пропускания), характеризующей поглощенную в слое хирального ФК световую энергию, получаем:

$$Q^\pm = 1 - [h_{1,2} a_2 + h_{2,1} a_1]^2 + \delta (a_2 - a_1)^2 + \\ + u \delta^2 (s_1 a_2 - s_2 a_1)^2 + u \delta (s_1 a_2 h_{1,2} + s_2 a_1 h_{2,1})^2 / \Delta^2, \quad (6)$$

где $\Delta = 2\gamma a_1 a_2$, $h_{1,2} = \gamma \pm 2\chi$, $k_{1,2} = 2ub_{1,2}/d$, $b_{1,2} = \sqrt{1 + \chi^2 \pm \gamma}$, $\gamma = \sqrt{4\chi^2 + \delta^2}$, $u = \pi d \sqrt{\epsilon_m} / \lambda$, $a_{1,2} = \cos(k_{1,2}d) \mp i u l_{1,2} \sin(k_{1,2}d) / (k_{1,2}d)$, $l_{1,2} = \gamma \pm 2$, $\chi = \lambda / (\sigma \sqrt{\epsilon_m})$, d – толщина слоя, знак “-” соответствует случаю, когда на слой падает свет с круговой поляризацией, совпадающей с винтом спирали, а “+” – свет с обратной круговой поляризацией.

3. Результаты и обсуждение

Как известно, при взаимодействии света со слоем хирального ФК конечной толщины действуют два механизма дифракции [10,11]: дифракция света на структуре среды (выражающаяся в том, что в определенной области частот, именуемой областью селективного отражения, свет претерпевает селективное по отношению к поляризации дифракционное отражение) и дифракция света в ограниченном объеме (выражающаяся в том, что вне области селективного отражения интенсивность отраженного света уменьшается, осциллируя и проходя через дифракционные максимумы и минимумы). Известно также, что при взаимодействии электромагнитной волны со средой неоднородности среды приводят к модуляции суммарной волны, возникающей в среде. В соответствии с существованием различных форм модуляции волны, должны существовать различные механизмы аномалии поглощения. В хиральных ФК, при наличии локальной анизотропии поглощения, имеет место эффект Бормана, заключающийся в аномально слабом (или сильном) поглощении излучения в условиях дифракционного рассеяния. Этот эффект хорошо известен для рентгеновских лучей. Суммарная волна, возбуждаемая в среде, модулирована. Эта модуляция похожа на ту, которая возникает в системе двух связанных осцилляторов. Когда узлы стоячей волны, возбуждаемой в среде, совпадают с позициями атомов, поглощение получается аномально слабым, но когда с позициями атомов совпадают ее гребни, поглощение аномально сильно. В отличие от случая рентгеновских лучей в кристаллах, в хиральных ФК эффект Бормана реализуется за счет поляризационных свойств собственных волн [10,11]. Чтобы понять физическую причину возможности уменьшения (или увеличения) поглощения, рассмотрим сначала картину суммарного волнового поля в хиральном ФК без поглощения в условиях дифракции. Поскольку одна из круговых поляризаций (та, знак которой противоположен знаку хиральности ФК) не испытывает дифракции, то речь пойдет в основном о волне дифрагирующей поляризации. На рис.1 представлены зависимости поглощения излучения Q в слое среды, азимута ψ и эллиптичности e суммарной волны, возникающей в среде, от длины волны λ при наличии анизотропного поглощения $\operatorname{Im} \epsilon_a = \operatorname{Im} \epsilon_m$ (кривая 4 показывает азимут минимального поглощения).

Падающий на слой свет имеет дифрагирующую круговую поляризацию. Если частота света находится в области селективного отражения (ОСО), то направление суммарного поля оказывается фиксированным для фиксированной координаты вдоль оси спирали. Более того, с изменением z это направление поворачивается вокруг z , но так, что угол между директором (локальной оптической осью) в каждой точке и этим направлением остается неизменным. Если частота света изменяется, то угол между директором и суммарным полем также изменяется. Причем на коротковолновой границе ОСО суммарное поле оказывается ориентированным вдоль направления, соответствующего меньшему главному значению локального тензора диэлектрической проницаемости $\hat{\epsilon}$. На длинноволновой границе ОСО поле направлено перпендикулярно направлению меньшего главного значения. Естественно, что введение поглощения (для определенности будем считать его пока слабым) существенно не влияет на поляризационные характеристики собственных волн. Поэтому и при наличии поглощения сохраняется описанная выше структура полей. Отсюда ясно, что если осцилляторы поглощения в молекулах хиральных ФК направлены вдоль длинной оси молекул (вдоль направления директора или главной оси, соответствующей ϵ_1), то минимальное поглощение будет наблюдаться на длинноволновой границе ОСО. Если же осцилляторы поглощения направлены перпендикулярно директору, то минимальное поглощение будет проявляться на коротковолновой границе ОСО [10,11].

Q, Ψ, e

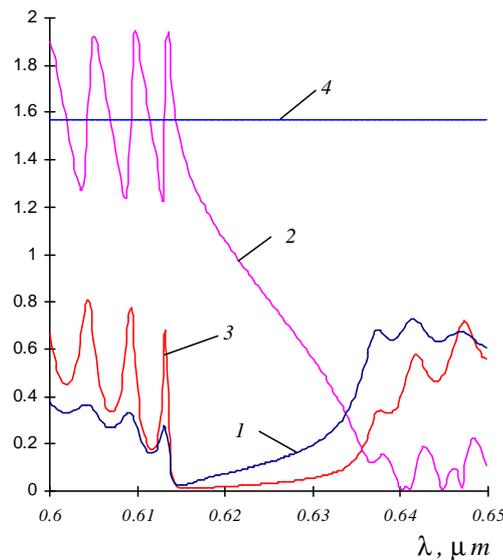


Рис.1. Зависимость поглощения излучения Q в слое среды (кр.1), азимута ψ (кр.2) и эллиптичности e (кр.3) суммарной волны, возникающей в среде, от длины волны λ при наличии анизотропного поглощения ($Im\epsilon_a \neq 0, Im\epsilon_a = Im\epsilon_m$) в случае падения на слой света круговой поляризации, совпадающей с винтом спирали. Параметры слоя таковы: $Re\delta\epsilon = 0.0332, Re\epsilon_m = 2.2165, d = 50\sigma, Im\epsilon_m = 0.01, \sigma = 0.42$ мкм.

На рис.2а представлены зависимости Q^{\mp} от длины волны (λ) в случае $\text{Im}\epsilon_a = \text{Im}\epsilon_m$ (соответственно, кривые 1 и 2) и в случае $\text{Im}\epsilon_a = -\text{Im}\epsilon_m$ (кривые 3 и 4) при слабой локальной анизотропии ($\delta = 0.033$). На рис.2б показаны те же зависимости при большой локальной анизотропии ($\delta = 0.95$). Как видно из рис.2а, при слабой локальной анизотропии полное подавление поглощения ($Q = 0$) наблюдается вблизи коротковолновой границы в случае $\text{Im}\epsilon_a = \text{Im}\epsilon_m$ (кр.1) и вблизи длинноволновой границы в случае $\text{Im}\epsilon_a = -\text{Im}\epsilon_m$ (кр.2). Свет с недифрагирующей поляризацией не проявляет особенностей поглощения ни в одном случае (кр.3 и 4). При большой локальной анизотропии прежде всего отметим огромное поглощение при малых геометрических толщинах. Кроме того, как видно из рис.2б, полного подавления поглощения здесь практически не происходит; более того, при $\text{Im}\epsilon_a = \text{Im}\epsilon_m$ Q имеет практически одинаковое значение на длинноволновой и коротковолновой границах ОСО. Видно также, что особенности поглощения проявляют световые волны обеих круговых поляризаций (Q в случае $\text{Im}\epsilon_a = \text{Im}\epsilon_m$ больше по величине, чем при $\text{Im}\epsilon_a = -\text{Im}\epsilon_m$).

В работе [20] исследованы особенности дифракционного отражения в хиральных ФК при большой локальной анизотропии и показано, что эти особенности связаны с изменениями СП при локальной анизотропии. Как известно, СП – это две поляризации, которые не изменяются при прохождении света через систему, а собственные значения – это значения передаточной

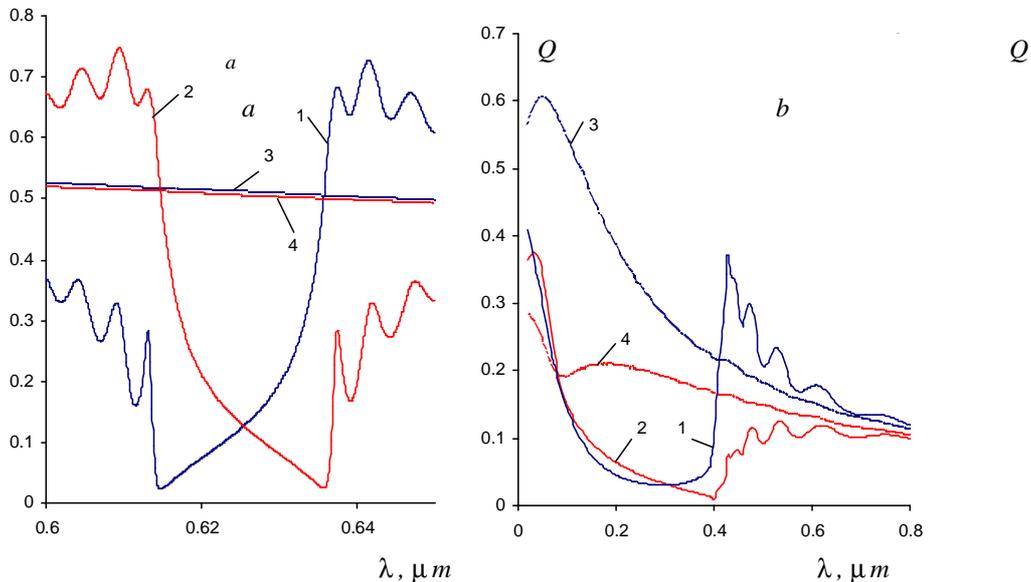


Рис.2. Зависимость Q^{\mp} от длины волны λ в случае $\text{Im}\epsilon_a = \text{Im}\epsilon_m$ (соответственно, кривые 1 и 3) и в случае $\text{Im}\epsilon_a = -\text{Im}\epsilon_m$ (кривые 2 и 4) при слабой локальной анизотропии (а, параметры те же, что и на рис.1) и при большой локальной анизотропии (б, $\text{Re}\delta = 0.95$, $\text{Re}\epsilon_m = 0.5$, $\text{Im}\epsilon_m = 0.005$, $d = 7\sigma$. Остальные параметры те же, что и на рис.1).

функции для комплексной амплитуды, соответствующие СП [21]. 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, в частности, для случая хиральных ФК при нормальном падении, для которого известно точное решение, и следовательно, известны поляризации собственных мод, СП практически совпадают с поляризациями собственных мод. В общем случае имеют место 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. Особенности СП и собственных значений для слоя хирального ФК при нормальном падении исследованы в работах [22,23]. В [22] вычислены СП для слоя хирального ФК с учетом точных граничных условий. Если в общем случае они очень сложны, то при условии $ad = 2\pi l$, $l = 1, 2, \dots$ они принимают простой вид, а именно:

$$\beta_{1,2} = (-2\chi \pm \gamma) / \delta, \quad (7)$$

(здесь $\beta = E/E_z$) поляризационная передаточная функция при круговых базисных поляризациях). Для выявления характерных особенностей СП хирального ФК с большой анизотропией ограничимся этим случаем.

Из (7) видно, что при слабой анизотропии ($\delta \ll 1$) СП представляют собой две квазикруговые поляризации с правым и левым обходом. СП изменяются с анизотропией и при увеличении (превращаются в эллиптические поляризации с правым и левым обходом. С дальнейшим увеличением анизотропии эллиптичность уменьшается и стремится к нулю в пределе $\delta \gg 1$. Таким образом, если в одном предельном случае ($\delta \ll 1$) СП являются ортогональными квазикруговыми поляризациями, то в другом предельном случае $\delta \gg 1$ они ортогональны, но уже имеют квазилинейную поляризацию.

Второе важное следствие анализа особенностей СП заключается в следующем. Как показано в [20], хиральные ФК при слабой анизотропии проявляют селективность по отношению к круговым поляризациям, а при громадной анизотропии - к линейным поляризациям. При промежуточных значениях анизотропии они теряют полную селективность по отношению к этим поляризациям. Анализ свойств СП показывает, что селективность - общее свойство хиральных ФК. Но эти среды проявляют селективность не по отношению к круговым или линейным поляризациям, а по отношению именно к СП [20]. Волна с одной СП испытывает полное дифракционное отражение, причем в ОСО при отсутствии поглощения коэффициент отражения точно равен единице, безотносительно к значению анизотропии. Волна с другой СП вообще не испытывает дифракционного отражения. При слабой анизотропии среда проявляет селективность по отношению к круговым поляризациям, поскольку в этом пределе СП совпадают с этими поляризациями. Аналогично, при громадной анизотропии хиральные ФК проявляют селективность по отношению к линейным поляризациям, поскольку в этом пределе СП превращаются в ортогональные линейные поляризации.

В вышеизложенном можно убедиться также непосредственно при помощи аналитических вычислений. Рассмотрим прохождение и отражение света при нормальном его падении на планарный слой хирального ФК. Будем предполагать, что диэлектрическая проницаемость среды, граничащей с обеих сторон с образцом, равна средней диэлектрической проницаемости образца. Будем рассматривать случай $ad = 2\pi l$, поскольку решение задачи в этом случае существенно

упрощается. Тогда для собственных значений передаточных функций для комплексных амплитуд прошедшей $V_{1,2}$ и отраженной $G_{1,2}$ волн получаем (согласно [13-15]) при падении на слой света с $\beta = \beta_{1,2}$:

$$V_{1,2} = 1/a_{1,2}, \quad G_{1,2} = ius_{1,2}h_{1,2}/(|\beta_{1,2}| \alpha_{1,2}). \quad (8)$$

Соответствующие коэффициенты отражения $R_{1,2}$ и прохождения $T_{1,2}$ определяются выражениями

$$R_{1,2} = 1/|a_{1,2}|^2, \quad T_{1,2} = |us_{1,2}h_{1,2}| / (|\beta_{1,2}| |a_{1,2}|)^2. \quad (9)$$

Таким образом, если особенности “отражения, прохождения” первой собственной волны полностью определяются нерезонансным волновым числом k_1 , то особенности “отражения, прохождения” второй собственной волны полностью определяются резонансным волновым числом k_2 .

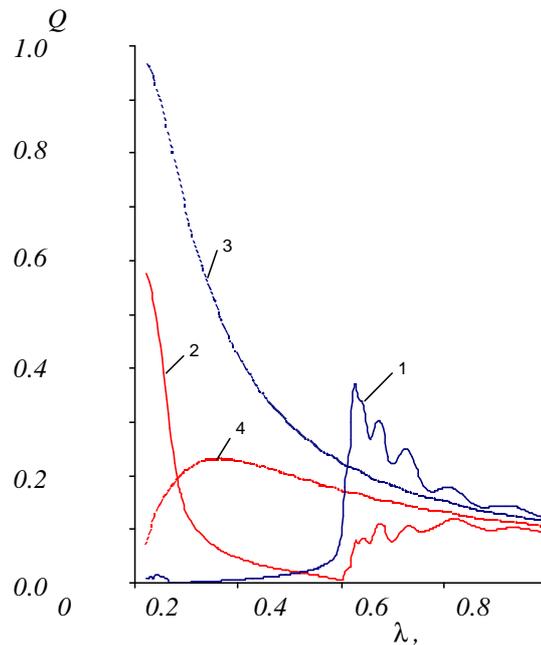


Рис.3. Зависимость поглощения излучения Q в слое от длины волны λ при $\text{Im}\epsilon_a = \text{Im}\epsilon_m = 0.005$ (кр.1) и при $\text{Im}\epsilon_a = -\text{Im}\epsilon_m = (0.005)$ (кр.2), в случае падения на слой света с дифрагирующей и недифрагирующей (соответственно, кривые 3 и 4) СП. Параметры те же, что и на рис.2б.

На рис.3 представлена зависимость поглощения излучения Q от длины волны λ при $\text{Im}\epsilon_a = \text{Im}\epsilon_m$ (кр.1) и при $\text{Im}\epsilon_a = -\text{Im}\epsilon_m$ (кр.2) в случае, когда на слой падает волна с дифрагирующей СП и с недифрагирующей СП (соответственно, кривые 3 и 4). Как видно из рисунка, на соответствующих границах ОСО дифрагирующая СП испытывает полное подавление поглощения. Таким образом, описанная в работе [23] физическая картина эффекта Бормана в хиральных ФК верна только в том случае, когда на среду падает свет с дифрагирующей СП. То есть только при падении на слой хирального ФК света с дифрагирующей СП возбуждаемая в среде суммарная волна в ОСО имеет линейную поляризацию, причем ориентированную на направление минимального поглощения

(на одной границе) и максимального поглощения (на другой границе). Подобная ситуация (когда СП не совпадают с круговыми поляризациями) наблюдается также при наклонном падении света на планарный слой хирального ФК. Так, в [24] экспериментально изучено аномальное прохождение (эффект Бормана) при наклонном падении света на планарный слой ХЖК и показано, что эффект не наблюдается при углах падения, больших 19° . В [25] показано, что это связано с изменением СП с углом падения (СП изменяются с ортогональных квазикруговых поляризаций при нормальном падении до ортогональных квазилинейных поляризаций при углах падения, близких к 90°). Отметим также, что подобная ситуация наблюдается также в том случае, когда средняя диэлектрическая проницаемость хирального ФК сильно отличается от диэлектрической проницаемости среды, граничащей с обеих сторон со слоем хирального ФК [26].

Отметим различие характера поглощения света с недифрагирующей СП в случаях $\text{Im}\epsilon_a = \pm \text{Im}\epsilon_m$, которое увеличивается с уменьшением длины волны. Это также находит свое объяснение. Действительно, как было отмечено выше, особенности собственных волн в среде полностью обусловлены особенностями соответствующих волновых чисел. Как известно, при слабой анизотропии мнимая часть нерезонансного волнового числа $\text{Im}k_1$ (от которого зависит поглощение недифрагирующей собственной волны) практически полностью определяется средним поглощением, и поглощение особенностей не имеет. В пределе же Могена величина $\text{Im}k_1$ зависит также от величины и знака $\text{Im}\epsilon_a$. При большой анизотропии влияние величины и знака $\text{Im}\epsilon_a$ на $\text{Im}k_1$ становится существенным. При увеличении анизотропии преломления оно простирается и до более длинных волн.

Значительное уменьшение поглощения Q волны с недифрагирующей СП с увеличением длины волны обусловлено тем, что здесь представлена большая область изменения длины волны (от 0.03163 мкм до 0.60444 мкм) и поэтому становятся значительными изменения, обусловленные изменением длины волны. Отметим увеличение френелевских отражений при увеличении анизотропии даже при рассмотренном нами случае $\epsilon_m = \epsilon$, где ϵ - диэлектрическая проницаемость среды, граничащей с обеих сторон со слоем хирального ФК). При большой анизотропии существенно увеличивается частотная ширина ОСО, и в пределах ОСО изменения СП становятся значительными. В соответствии с этим в пределах ОСО становятся значительными также изменения других оптических характеристик.

Таким образом, в работе исследованы особенности поглощения излучения в хиральных ФК при большой локальной анизотропии. Нами показано, что при большой анизотропии (в отличие от случая слабой анизотропии) не происходит аномально сильного поглощения и подавления поглощения (при падении на систему света с резонансной круговой поляризацией). Это обусловлено тем, что при большой анизотропии СП перестают быть круговыми поляризациями и что СП изменяются с изменением анизотропии. Мы показали, что в общем случае аномально сильное поглощение и подавление поглощения происходят при падении на систему света с резонансной СП.

ЛИТЕРАТУРА

1. **E.Yablonoich.** Phys. Rev. Lett., **58**, 2059 (1987).
2. **S.John.** Phys. Rev. Lett., **58**, 2486 (1987).
3. **J.D.Joannopoulos, R.D.Meade, J.N.Winn.** Photonic crystals. Princeton, U. Princeton Press, N.J., 1995.
4. **J.Pendry.** J. Mod. Opt., **41**, 209 (1994).
5. **P.G.De Gennes, J.Prost.** The physics of liquid crystals. Oxford, Clarendon, 1993.
6. **L.J.Hodgkinson, Q.H.Wu, K.E.Torn,** et al. Opt. Commun., **184**, 57 (2000).
7. **S.Pursel, M.W.Horn, M.C.Demirel, A.Lakhtakia.** Polymer, **46**, 9544 (2005).
8. **H. de Vries.** Acta Cryst., **4**, 219 (1951).
9. **Е.И.Кац.** ЖЭТФ, **59**, 1854 (1970).
10. **В.А.Беляков, В.Е.Дмитриенко, В.П.Орлов.** УФН, **127**, 221 (1979).
11. **В.А.Беляков.** Дифракционная оптика периодических сред сложной структуры. М., Наука, 1988.
12. **С.Чандрасекар.** Жидкие кристаллы. М., Мир, 1980.
13. **Г.А. Варданиян, А.А. Геворгян.** Кристаллография, **42**, 723 (1997).
14. **Г.А.Варданиян, А.А.Геворгян.** Кристаллография, **42**, 316 (1997).
15. **А.А.Геворгян.** Опт. и спектр., **89**, 685 (2000).
16. **Г.А.Варданиян, А.А.Геворгян** и др. Кристаллография, **43**, 793 (1988).
17. **О.М.Аракелян, А.А.Геворгян, О.С.Ерицян.** Изв. НАН Армении, Физика, **35**, 255 (2000).
18. **О.М.Аракелян, А.А.Геворгян.** Изв. НАН Армении, Физика, **36**, 67 (2001).
19. **А.Н.Gevorgyan.** Mol. Cryst. Liq. Cryst., **382**, 1 (2002).
20. **А.Н.Gevorgyan, M.Z.Narutyunyan,** et al. Mol. Cryst. Liq. Cryst., **432**, 69 (2005).
21. **R.M.A.Azzam, N.M.Bashara.** Ellipsometry and polarized light. Amsterdam, North-Holland, 1977.
22. **Г.А.Варданиян, А.А.Геворгян, О.С.Ерицян.** Опт. и спектр., **85**, 640 (1998).
23. **R.Nityananda.** Mol. Cryst. Liq. Cryst., **21**, 315 (1971).
24. **S.Endo, T.Kuribara, T.Akahane.** Jpn. J. Appl. Phys., **22**, L499 (1983).
25. **Y.Sah, K.A.Suresh.** J. Opt. Soc. Am. A., **11**, 740 (1994).
26. **А.А.Геворгян.** ЖТФ, 70, № 9, 82 (2000).

ԼՈՒՅՄԻ ԿԼԱՆՄԱՆ ԱՌԱՆՁՆԱՀԱՏԿՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԸ ԼՈԿԱԼ ՄԵԾ ԱՆԻՉՈՏՐՈՊԻԱՅՈՎ
ՕԺՏՎԱԾ ՔԻՐԱԼ ՖՈՏՈՆԱՅԻՆ ԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐՈՒՄ

Մ.Ձ. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ

Քննարկված է լույսի փոխազդեցությունը քիրալ ֆոտոնային բյուրեղի շերտի հետ: Ուսումնասիրված են Բորմանի երևույթի առանձնահատկությունները մեծ անիզոտրոպիայի դեպքում: Հետազոտված են սեփական բևեռացումների (ՄԲ) առանձնահատկությունները և ցույց է տրված, որ եթե $\delta \ll 1$ սահմանում այս բևեռացումները օրթոգոնալ են ու քվադրիչրջանային, ապա $\delta \gg 1$ սահմանում նրանք նորից օրթոգոնալ են, բայց արդեն ունեն քվադրիզմային բևեռացում ($\delta = (\epsilon_1 - \epsilon_2) / (\epsilon_1 - \epsilon_2)$, ϵ_1 -ը և ϵ_2 -ը միջավայրի դիէլեկտրական թափանցելիության թենզորի գլխավոր արժեքներն են): Ցույց է տրված, որ ընդհանուր դեպքում քիրալ ֆոտոնային բյուրեղները դրսևորում են սելեկտիվություն ոչ թե շրջանային բևեռացումների նկատմամբ (ինչպես $\delta \ll 1$ սահմանում), այլ հենց ՄԲ-ների նկատմամբ:

*FEATURES OF LIGHT ABSORPTION IN CHIRAL PHOTONIC CRYSTALS
WITH A LARGE LOCAL ANISOTROPY*

M.Z. HARUTYUNYAN

Light interaction with a chiral photonic crystal layer is considered. Features of the Borrmann effect at large anisotropy are studied. The natural polarizations are considered and it is shown that if $\delta \ll 1$ ($\delta = (\epsilon_1 - \epsilon_2)/(\epsilon_1 + \epsilon_2)$), where ϵ_1, ϵ_2 are the principal values of the dielectric permittivity tensor), then the natural polarizations are orthogonal and quasi-circular, and if $\delta \gg 1$, they are orthogonal but linearly polarized. It is established that in the general case the chiral photonic crystals show complete selectivity not to the circularly polarized light (as at $\delta \ll 1$), but with respect to natural polarizations only.

УДК 621.315

ОПТИЧЕСКОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ, ОБУСЛОВЛЕННОЕ ПЕРЕХОДАМИ МЕЖДУ ДОНОР-АКЦЕПТОРНЫМИ ПАРАМИ В ПАРАБОЛИЧЕСКОЙ КВАНТОВОЙ ЯМЕ

А.А. КОСТАНЫАН

Российско-Армянский (Славянский) государственный университет, Ереван

(Поступила в редакцию 10 января 2007 г.)

Изучено межпримесное оптическое поглощение в параболической квантовой яме. В предположении слабого легирования определены вероятности перехода “акцептор–донор” и вычислен соответствующий коэффициент поглощения света. При этом, в рамках модели ближайшего соседа, учтено уширение примесных уровней, связанное с распределением донор-акцепторных пар по расстоянию. Определен характер зависимости коэффициента поглощения от концентрации доминирующей примеси, а также изучено “синее смещение” в спектре поглощения.

1. Введение

Наряду с традиционными методами исследования структурных неоднородностей твердых тел, существует также возможность изучения этих образований с помощью оптических методов [1-3]. В частности, при изучении спектров оптического излучения или поглощения полупроводниками (как массивными, так и размерно-квантованными) можно получить представление об особенностях распределения дефектов в изучаемых образцах. Это тем более важно, что используемые в оптоэлектронике полупроводниковые соединения, как правило, всегда содержат дефекты (дислокации, донорные или же акцепторные центры), наличие которых может существенным образом отразиться на их физических характеристиках. Поэтому вполне естественным является вопрос об изучении влияния различных неоднородностей на характер оптического поглощения или же излучения в полупроводниковых соединениях. В частности, наличие примесных центров в полупроводниковых структурах существенным образом влияет на характер оптического спектра поглощения.

Ранее, в работах [4-6] было изучено примесное поглощение в полупроводниковых квантовых ямах (КЯ). Так, авторы [4] на основе вариационного метода рассмотрели оптические переходы между зоной валентности и донорными уровнями в КЯ из $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ с прямоугольным ограничивающим потенциалом конечной высоты. Аналогичная задача была рассмотрена в работе [5], где, однако, исследовалась КЯ с прямоугольным, бесконечно глубоким ограничивающим потенциалом, при этом донорные уровни описывались в рамках модели двумерного водородоподобного атома. Позже, в работе [6] на основе вариационного метода был вычислен коэффициент поглощения (КП), обусловленный переходами между зоной валентности и основным донорным уровнем, а также между основным акцепторным уровнем и зоной

проводимости в параболической КЯ.

Следует отметить, что наряду с переходами “примесь → зона” и “зона → примесь”, возможны также переходы “примесь → примесь” [7]. Отметим, что ранее в работе [8] был рассчитан межпримесный КП дополнительной слабой волны в поле резонансного лазерного излучения для массивного полупроводника при условиях слабого легирования ($R \geq a_d, a_a$, где a_d, a_a – соответственно, боровские радиусы донора и акцептора, а R – среднее расстояние донорно-акцепторной пары (ДАП)). Задача была ограничена случаем $a_d \ll a_a$, что хорошо выполняется для многих полупроводников и умеренной концентрации доминирующей примеси. При этом было учтено уширение примесных уровней, связанное с межпримесным распределением пар по расстоянию R , в результате которого возникает необходимость усреднения ДАП по расстоянию.

Важной особенностью низкоразмерных структур является прямая зависимость профиля ограничивающего потенциала изучаемой системы от метода ее выращивания. При этом может возникнуть ситуация, когда в результате перемешивания изовалентных компонент низкоразмерной структуры и окружающей среды происходит сглаживание профиля ограничивающего потенциала [9]. В первом приближении такой потенциал можно аппроксимировать параболическим [10,11], рассматривая его как более реалистичный, чем прямоугольный. В связи с этим вызывает интерес рассмотрение межпримесного поглощения в параболической квантовой яме, в предположении, что одна из примесей является доминирующей.

В данной работе теоретически исследуется оптическое поглощение в параболической квантовой яме $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$, обусловленное переходами “акцептор–донор”.

2. Энергетический спектр

Для примесного гамильтониана можно записать

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_z^2}{2m^*} + \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m^*} + \frac{m^* \omega^2 z^2}{2} - \frac{e^2}{\kappa \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}}, \quad (1)$$

где m^* – эффективная масса электрона (дырки), κ – диэлектрическая проницаемость (для GaAs $\kappa = 12.9$), z_i ($i = a, d$) – расположение примеси вдоль оси OZ , ω – частота ограничивающего потенциала, определяемая с помощью вириальной теоремы согласно соотношению $\omega \ll \hbar/m^*L^2$, где L – ширина КЯ. В дальнейшем мы для точного равенства будем представлять ω в зависимости от L в виде $\omega = \gamma \hbar/m^*L^2$, где γ – некоторый подгоночный параметр, обеспечивающий точное равенство.

За начало координатной плоскости XOY выбрано расположение примеси, так как все точки нахождения примеси в плоскости КЯ эквивалентны. Мы не будем учитывать межподзонное связывание уровней примеси [12] и представим волновую функцию основного состояния системы в виде

$$\psi_0(\rho, z) = \Phi_0(\rho) \chi_0(z), \quad (2)$$

где $\Phi_0(\rho)$ – волновая функция, описывающая состояние системы в плоскости КЯ, а $\chi_0(z)$ описывает состояние системы вдоль оси квантования OZ .

Волновая функция $\Phi_0(\rho)$ является решением двумерного уравнения Шредингера

$$\left[\frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m^*} + V_{eff}(\rho) \right] \Phi_0(\rho) = (\varepsilon - E_n) \Phi_0(\rho), \quad (3)$$

где $V_{eff}(\rho)$ – эффективный кулоновский потенциал в плоскости XOY :

$$V_{eff}(\rho) = -\frac{e^2}{\kappa} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{|\chi_0|^2}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} dz. \quad (4)$$

Решение уравнения (3) будем искать на основе вариационного метода. В связи с этим волновую функцию основного состояния выберем в виде

$$\Phi_0(\rho) = \frac{1}{\lambda} \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-\rho/\lambda}, \quad (5)$$

где λ – вариационный параметр.

Отметим также, что нами обсуждаются состояния с $n = 0$, т.е. для $\chi_0(z)$ можем записать

$$\chi_0(z) = \left(\frac{m^* \omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{z^2}{2a^2}}, \quad (6)$$

где $a = \sqrt{\hbar/m^* \omega}$ – осцилляторная длина.

Энергия основного состояния получается после минимизации функции

$$\varepsilon(\lambda, z_i) = E_0 + \frac{\hbar^2}{2m^* \lambda^2} - \frac{2e^2}{\kappa \lambda} \int_0^{\infty} x e^{-x} dx \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{|\chi_0|^2 dz}{\sqrt{x^2 + \frac{4}{\lambda^2} (z - z_i)^2}}. \quad (7)$$

Вычислив интегралы, входящие в (7), сначала для случая $z_i = 0$, после преобразований для $\varepsilon(\lambda, 0)$ получим

$$\varepsilon(\lambda, 0) = \frac{\gamma \hbar^2}{2m^* L^2} + \frac{\hbar^2}{2m^* \lambda^2} - \frac{4e^2}{\kappa \lambda} \sqrt{\frac{\gamma}{\pi}} J(\lambda), \quad (8)$$

где для $J(\lambda)$ имеем

$$J(\lambda) = \frac{4}{3\gamma^2} \left(\frac{L}{\lambda} \right)^3 {}_2F_2 \left[1, 2; \frac{3}{2}, \frac{5}{2}; -\frac{L^2}{\gamma \lambda^2} \right] + \frac{\pi}{2\gamma \sqrt{\gamma}} \frac{L^2}{\lambda^2} \exp \left[-\frac{L^2}{\gamma \lambda^2} \right] {}_1F_1 \left[\frac{1}{2}; 2; -\frac{L^2}{\gamma \lambda^2} \right] - \frac{L}{\gamma \lambda}. \quad (9)$$

Здесь ${}_2F_2[a_1, b_1; a_2, b_2; x]$ – обобщенная гипергеометрическая функция, ${}_1F_1[a; b; x]$ – вырожденная гипергеометрическая функция Куммера.

Энергию связи определим как разность

$$E_{bind} = E_0 - \min_{\lambda} \varepsilon(\lambda, z_i). \quad (10)$$

3. Коэффициент поглощения

Перейдем теперь к вычислению коэффициента поглощения света, обусловленного переходами между основными уровнями донор-акцепторной пары в изучаемой структуре.

Рассмотрим слабо легированную КЯ с концентрацией доминирующей примеси n_a , когда $\bar{R} \ll a_d, a_a$ (\bar{R} – среднее расстояние между донором и акцептором в плоскости КЯ). Тогда основной вклад в вероятность перехода будут давать переходы в ДАП-ах с $R \geq a_d, a_a$. В этом случае энергию взаимодействия пары можно принять равной $e^2/\kappa R$ и рассматривать ее как сдвиг энергетического уровня акцептора [8].

Волновые функции и энергии, описывающие связанные состояния электрона на акцепторе и доноре, представим в виде

$$\Psi_a = \frac{1}{\lambda_a} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{m_v \omega_l}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{(z-z_0)^2}{2a_l^2}} e^{-\frac{|\mathbf{p}-\mathbf{R}|}{\lambda_a}} u_{v,0}(\mathbf{p}-\mathbf{R}), \quad (11)$$

$$\Psi_d = \frac{1}{\lambda_d} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{m_c \omega_2}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{z^2}{2a_d^2}} e^{-\frac{\rho}{\lambda_d}} u_{c,0}(\mathbf{p}), \quad (12)$$

$$E_a = -\min \varepsilon_a(\lambda_a) - \frac{e^2}{\kappa R}, \quad (13)$$

$$E_d = \min \varepsilon_d(\lambda_d) + \varepsilon_{gap}. \quad (14)$$

где λ_a, λ_d – вариационные параметры, $u_{v,0}, u_{c,0}$ – блоховские амплитуды в центре зоны Бриллюэна (в рассматриваемой структуре экстремумы зон находятся в центре зоны Бриллюэна), ε_{gap} – ширина запрещенной зоны.

Коэффициент поглощения света определяется по формуле [13]

$$K_R(\omega) = \frac{4\pi^2 c}{n\omega V} \frac{|M_{ad}|^2}{|A_0|^2} \delta(E_f - E_i - \hbar\omega), \quad (15)$$

где V – объем образца, M_{ad} – матричный элемент перехода акцептор–донор, n – показатель преломления, A_0 – амплитуда векторного потенциала падающей электромагнитной волны.

Для матричного элемента можно записать

$$M_{ad} = \frac{2ec}{\pi m_0 c} (\mathbf{e} \mathbf{p}_{cv}) \frac{1}{\lambda_a \lambda_d} F(R) \xi(z_0), \quad (16)$$

где \mathbf{p}_{cv} – матричный элемент, обусловленный блоховскими амплитудами, \mathbf{e} – поляризация падающего света. Посредством $F(R)$ и $\xi(z_0)$ мы обозначили следующие интегралы:

$$F(R) = \int_0^{2\pi} \int_0^\infty e^{-\left(\frac{1}{\lambda_a} \sqrt{\rho^2 + R^2} - 2\rho R \cos\varphi + \frac{1}{\lambda_d} \rho \right)} \rho d\rho d\varphi, \quad (17)$$

$$\xi(z_0) = \sqrt{\frac{\gamma}{\pi L^2}} \int_{-\infty}^\infty e^{-\gamma \frac{z_0^2}{2L^2}} e^{-\gamma \frac{(z^2 - z_0 z)}{L^2}} dz. \quad (18)$$

Как видно из (15), переходы возможны только между такими ДАП-ами, расстояние между которыми определяется из закона сохранения энергии, т.е.

$$R_l \equiv R = \frac{e^2}{\kappa(\hbar\omega - \tilde{\varepsilon}_g)}, \quad (19)$$

где

$$\tilde{\varepsilon}_g = \varepsilon_g + E_d^0 + E_a^0, \quad E_a^0 = \min_{\lambda_a} \varepsilon_a(\lambda_a), \quad E_d^0 = \min_{\lambda_d} \varepsilon_d(\lambda_d). \quad (20)$$

Считая R меняющимся непрерывно при $n_a \square n_d$, запишем выражение для спектральной плотности поглощения [8]

$$K(\omega) = N_d \int_0^{\infty} K_R(\omega) W(R) dR, \quad (21)$$

где N_d – число доноров, $W(R)$ – функция распределения пар по значениям R .

Возьмем в качестве функции распределения пар по R закон распределения ближайшего соседа [14], принимая, что $W(R)$ не зависит от z :

$$W(R) = 2\pi R n_a \exp\{-\pi R^2 L n_a\}. \quad (22)$$

После усреднения по (22) для коэффициента поглощения окончательно получим следующую формулу:

$$K(\omega) = \frac{2^5 \pi N n_a^- n_d^+}{L \omega \lambda_a^2 \lambda_d^2 c m_0^2} \sqrt{\frac{2\pi}{\gamma}} |\mathbf{e} \mathbf{p}_{cv}|^2 |\xi(z_0)|^2 |F(R_l)|^2 R_l^3 \exp\{-\pi R_l^2 n_a^-\}, \quad (23)$$

где n_a^- и n_d^+ – поверхностные концентрации акцепторных и донорных примесей, соответственно.

4. Обсуждение результатов

Для численной оценки КП света использованы следующие численные значения параметров задачи для GaAs: $\varepsilon_{gap} = 1.519$ эВ, $m_v = 0.34 m_e$, $m_c = 0.067 m_e$, $n = 3.6$. Расчеты выполнены для концентраций доминирующей примеси (акцепторов) $n_a^- = 10^{11}$ см² и степени компенсации $k = 0.1$, что является наибольшим допустимым значением для слабого легирования. Отметим, что значение межпримесного поглощения на порядок меньше примесного поглощения при переходах “зона–примесь” и “примесь–зона” [6].

На рис.1 приведены зависимости коэффициента поглощения от частоты падающего света при постоянной степени компенсации, для различных значений концентрации доминирующей примеси ($n_a^- = 10^{10}$ см⁻², $n_a^- = 5 \times 10^{10}$ см⁻², $n_a^- = 10^{11}$ см⁻²). Как и следовало ожидать, с уменьшением концентрации доминирующей примеси наблюдается уменьшение коэффициента поглощения. При этом частота, соответствующая пороговому значению коэффициента поглощения, незначительно уменьшается (“синее смещение”), что является следствием ослабления перекрытия волновых функций донор-акцепторной пары.

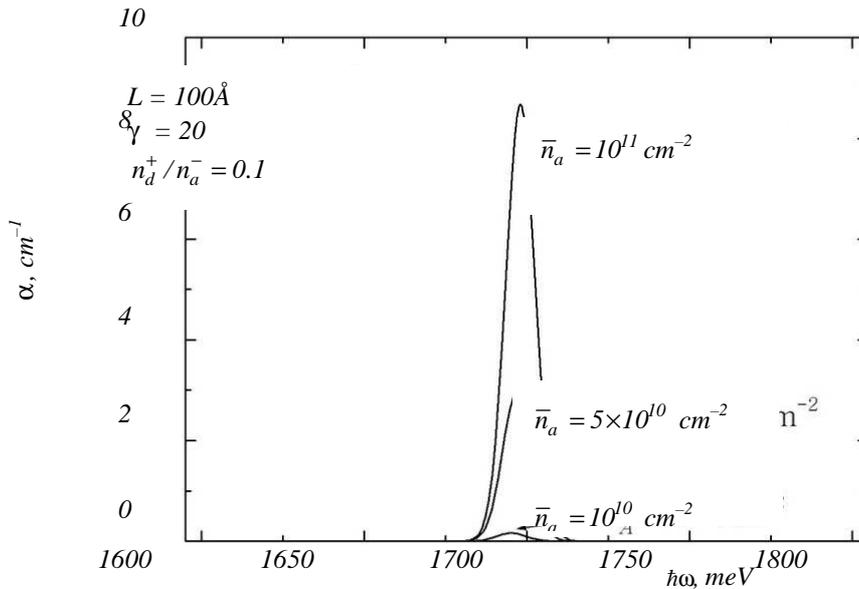


Рис.1. Зависимость коэффициента поглощения от частоты падающего света для различных концентраций доминирующей примеси при постоянной степени компенсации.

Следует отметить важную специфику межпримесных переходов, а именно: эти переходы имеют место между уровнями, относящимся к различным примесным атомам, тогда как обычно рассматриваются переходы между уровнями одного и того же атома. Именно из-за этого обстоятельства возникает необходимость усреднения КП по расстояниям ДАП, чем и объясняется концентрационное уширение кривых поглощения.

Работа выполнена в рамках Национальной программы “Полупроводниковая наноэлектроника”.

ЛИТЕРАТУРА

1. D.O.Toginho Filho, I.F.L. Dias, E.Laureto, J.L.Duarte, S.A.Laurencio, L.C.Pocas. J. Appl. Phys., **97**, 123702 (2005).
2. A.Guzman, J.L.Sanchez-Rojas, J.M.G.Tijero, J.J.Sanchez, J.Hernando, E.Calleja, E.Mufioz, G.Vergara, M.T.Montojo, L.J.Gornez, P.Rodriguez, R.Alrnazan, M.Verdu. IEEE Proc.-Optoelectron., **146**, 89 (1999).
3. J.Kundrotas, A.Cerskus, S.Asmontas, G.Valusis, B.Sherliker, M.P.Halsall, M.J.Steer, E.Johannessen, P.Harrison. Phys. Rev. B, **72**, 235322 (2005).
4. L.E.Oliveira, R.Perez-Alvarez. Phys. Rev. B, **40**, 10460 (1989).
5. А.М.Казарян, Э.М.Казарян. ФТП, **7**, 1383 (1977).
6. Е.М.Казарян, А.А.Костанян, Н.А.Саркисян. Physica E, **28**, 423 (2005).
7. А.А.Киракосян, Э.А.Саркисян. Изв. АН Арм. ССР, Физика, **19**, 129 (1984).
8. Э.М.Казарян, А.О.Меликян, Г.Р.Минасян. ФТП, **13**, 2034 (1979).
9. J.Barker, E.O'Raily. Physica E, **4**, 231 (1999).
10. P.A.Maksym, T.Chakraborty. Phys. Rev. Lett., **65**, 108 (1990).
11. F.M.Peeters. Phys. Rev. B, **42**, 1486 (1990).
12. G.Bastard. Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures. Les Ulis Cedex, Les Editions de Physique, 1989.
13. А.И.Ансельм. Введение в теорию полупроводников. М., Наука, 1978.
14. G.M.Duћhler. Phys. Stat. Sol. (b), **45**, 705 (1971).

ՕՊՏԻԿԱԿԱՆ ԿԼԱՆՈՒՄԸ ՊԱՅՄԱՆԱՎՈՐՎԱԾ
ԴՈՆՈՐ-ԱԿՑԵՊՏՈՐԱՅԻՆ ԶՈՒՅԳԵՐԻ ՄԻՋԵՎ ԱՆՑՈՒՄՆԵՐՈՎ ՊԱՐԱԲՈԼԱՅԻՆ
ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ՓՈՍՈՒՄ

Ա.Ա. ԿՈՍՏԱՆՅԱՆ

Տեսականորեն հետազոտված է միջխառնուրդային օպտիկական կլանումը պարաբոլային քվանտային փոսում: Թույլ լեգիրացման պայմանի դեպքում որոշված է ակցեպտոր-դոնոր անցումների հավանականությունը, ինչպես նաև հաշվարկված է համապատասխան կլանման գործակիցը: Հաշվի է առնված կլանման կորի լայնացումը՝ պայմանավորված միջխառնուրդային հեռավորությունների միջինացմամբ: Հետազոտված է կլանման գործակցի կախման բնույթը գերակշռող խառնուրդի կոնցենտրացիայից, ինչպես նաև կլանման սպեկտրի կապույտ շեղումը:

*OPTICAL ABSORPTION CAUSED BY THE TRANSITIONS
BETWEEN DONOR-ACCEPTOR PAIRS
IN A PARABOLIC QUANTUM WELL*

A.A. KOSTANYAN

The interimpurity optical absorption in a parabolic quantum well is studied theoretically. Under the assumption of a lightly doped semiconductor, the acceptor-to-donor transitions probabilities are determined, as well as the corresponding absorption coefficient is calculated. The spreading of the absorption curve as a result of averaging over impurity distances is taken into account. The dependence of the absorption coefficient on the impurity concentration is determined and the blue shift in the absorption spectrum is studied.

УДК 548.0

ФОТОТОК В ДВУМЕРНОЙ *n-p-n* СТРУКТУРЕ, ИНДУЦИРОВАННЫЙ ФОКУСИРОВАННЫМ ОПТИЧЕСКИМ ПУЧКОМ

М.С. СААКЯН¹, С.Г. ПЕТРОСЯН²

¹Ереванский государственный университет

²Российско-Армянский государственный университет

(Поступила в редакцию 27 декабря 2006 г.)

Теоретически исследовано возникновение поперечного фототока при локальном возбуждении оптическим пучком поверхности *n-p-n*-структуры, реализованной на основе двумерного электронного газа. Показано, что величина и знак фототока зависят от координаты центра светового пятна. Выяснены условия линейности характеристики, когда становится возможным создание на основе двумерных биполярных структур позиционно-чувствительных детекторов, обладающих высокой пространственной разрешающей силой.

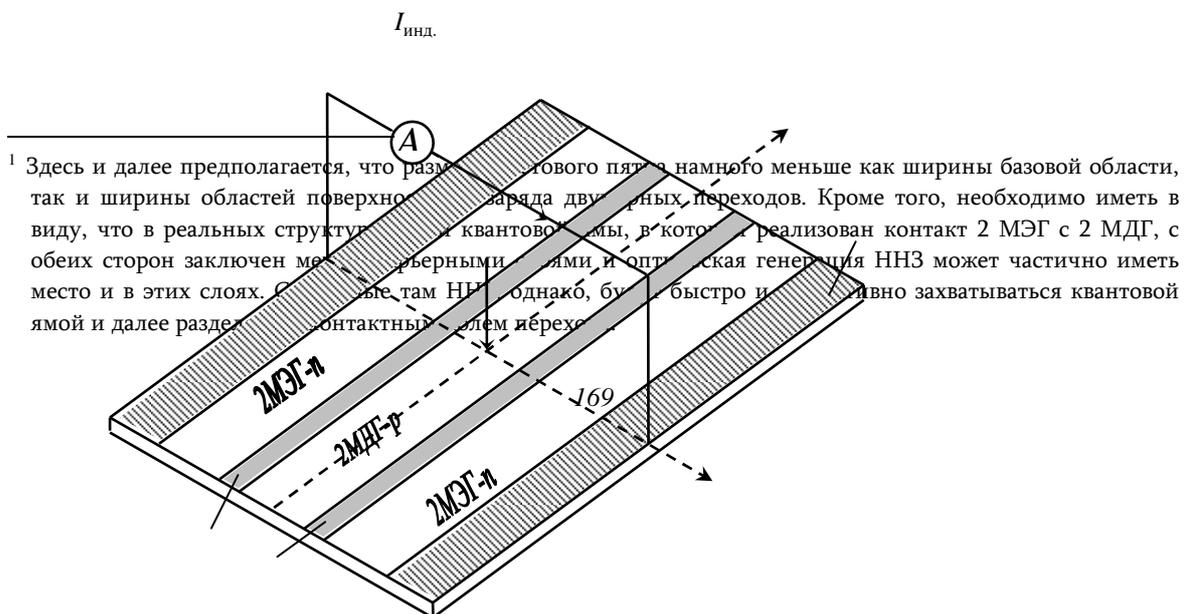
1. Введение

В структурах с биполярной проводимостью, созданных на основе двумерного электронного газа, *p*- и *n*-области, как правило, находятся в одной плоскости и при освещении фокусированным оптическим (лазерным) излучением возможно возникновение поперечного фотонапряжения (или фототока) [1,2]. Обычно такие планарные структуры создаются методом ионной имплантации, когда в определенных участках структуры с уже легированной квантовой ямой вводятся компенсирующие примеси [3]. В [4] было показано, что реализованные таким образом поперечные фотодиоды имеют большую фоточувствительную поверхность и высокую фоточувствительность, а при освещении фокусированным оптическим пучком проявляют фотосигнал, величина и знак которого зависят от координат пучка на поверхности структуры. Это свойство позволяет, во-первых, определить ширину области поверхностного заряда и ее зависимость от приложенного напряжения для двумерных *p-n*-переходов, а во-вторых, использовать такие структуры в качестве координатно-чувствительных детекторов, характеризуемых линейной зависимостью фотоответа от смещения пучка вдоль одной или двух координатных осей, а также наличием "нулевой точки" [2].

Целью данной работы является теоретическое исследование зависимости фототока двумерной *n-p-n*-структуры от координаты освещающего оптического пучка, выявление условий его линейности и оценка величины координатной чувствительности такого детектора как датчика смещения [5,6].

2. Аналитическая модель

Структура рассматриваемого фотоэлемента схематически представлена на рис.1. Она представляет собой планарную структуру с двумя p - n -переходами, образованными между базовой p -областью двумерного дырочного газа (2 МДГ) и двумя n -областями двумерного электронного газа (2 МЭГ). Линии этих переходов параллельны и расположены на расстоянии d друг от друга. К двум n -областям созданы плоские омические контакты, которые закорочены для измерения индуцированного фототока при освещении такого фотоэлемента сфокусированным на его поверхности оптическим пучком. При каждом положении пучка измеряются величина и знак стационарного фототока, возникшего во внешней цепи этой структуры. Поскольку в фотоэлементе имеются два обратно включенных p - n -перехода, то измеряемый фототок есть разность фототоков, индуцированных в каждой из них при заданном профиле генерации неравновесных носителей заряда (ННЗ). Когда световое пятно расположено в области между краями поверхностного заряда p - n -переходов ($0 \leq x \leq l$, $-\infty < y < +\infty$), то генерация ННЗ имеет место только в квазинейтральной части базы¹, а возникшие после поглощения света ННЗ диффундируют к областям поверхностного заряда и, разделяясь контактными электрическими полями, создают фототоки в переходах. При ширине p -области порядка диффузионной длины электронов ($d \approx L_n$) следует ожидать сильную зависимость суммарного фототока от положения оптического пучка, так как при прочих равных условиях число разделенных каждым переходом ННЗ зависит от расстояния центра области генерации до краевой линии его области поверхностного заряда. Фототок, генерированный данным p - n -переходом, будет максимальным, если генерация ННЗ произойдет в пределах его области поверхностного заряда и произойдет полное разделение ННЗ поперечным электрическим полем контакта (без каких-либо рекомбинационных потерь). Измеряя на эксперименте величину области смещения пучка, при котором наблюдается более или менее постоянный фототок, можно определить ширину области поверхностного заряда и ее зависимость от внешнего смещения [2]. Если же оптический пучок сфокусирован в пределах квазинейтральной области базы, то, во-первых, из-за возможных рекомбинационных потерь и, во-вторых, из-за того, что лишь часть генерированных ННЗ диффундирует к данному переходу, фототок каждого перехода будет меньше своего максимального значения. Когда оптический пучок смещается к центру p -области, то суммарный фототок должен уменьшаться и в симметричной структуре обращаться в нуль. При дальнейшем смещении возникнет фототок другого знака, величина которого увеличится по мере приближения светового пятна к области поверхностного заряда противоположного p - n -перехода.



x

Области поверх-
ностного заряда

Рис.1. Структура поперечного фотоэлемента на основе двумерной p - n - p -структуры.

Для определения зависимости фототока от координаты центра оптического пучка необходимо решить двумерное уравнение непрерывности для избыточных неосновных носителей заряда ($n(x, y)$) в квазинейтральной части p -области:

$$G_n + \frac{1}{e} \operatorname{div} j_n - \frac{\Delta n}{\tau_n} = 0, \quad j_n = e D_n \nabla n, \quad (1)$$

где j_n – вектор плотности тока, τ_n – время жизни электронов, G_n – поверхностная скорость генерации электронно-дырочных пар в результате поглощения оптического пучка, а D_n и $L_n = \sqrt{D_n \tau_n}$ есть коэффициент и длина диффузии электронов. Если считать, что оптический пучок с эффективным радиусом Δ сфокусирован в точке с координатами (ξ_0, η_0) , то для функции генерации можно взять гауссову форму

$$G_n = g_n \exp\left(-\frac{(x - \xi_0)^2 + (y - \eta_0)^2}{\Delta^2}\right), \quad (2)$$

где амплитуда g_n выражается через мощность P падающего оптического излучения и в случае монохроматического пучка с частотой ω равна $P/\pi\Delta^2\hbar\omega$ (\hbar – постоянная Планка). Решение уравнения (1) должно удовлетворять граничным условиям на краях областей поверхностного заряда p - n -переходов:

$$\Delta n(x, 0) = \Delta n(x, l) = 0. \quad (3)$$

Легко показать, что $\Delta n(x, y)$ можно представить в виде

$$\Delta n(x, y, \xi_0, \eta_0) = \frac{g_n \tau_n}{\Delta^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \int_0^l d\eta G(x, y, \xi, \eta) e^{-\frac{(\xi - \xi_0)^2 + (\eta - \eta_0)^2}{\Delta^2}}, \quad (4)$$

где $G(x, y, \xi, \eta)$ является функцией точечного источника (функция Грина), удовлетворяющей граничным условиям (3). Она имеет форму

$$G(x, y, \xi, \eta) = \frac{I}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} [K_0(r_n) - K_0(r'_n)], \quad (5)$$

где K_0 есть функция Бесселя нулевого порядка мнимого аргумента [7], а

$$r_n = \sqrt{(x-\xi)^2 + (y-\eta_n)^2}, \quad r'_n = \sqrt{(x-\xi)^2 + (y-\eta'_n)^2}$$

$$\eta_n = 2nl + \eta, \quad \eta'_n = 2nl - \eta.$$

(6)

В результате для индуцированного тока можно получить следующее выражение:

$$I = I^{(1)}_{ind} - I^{(2)}_{ind} = \int_{-\infty}^{+\infty} eD_n \frac{\partial n(x, y)}{\partial y} \Big|_{y=0} dx - \int_{-\infty}^{+\infty} eD_n \frac{\partial n(x, y)}{\partial y} \Big|_{y=l} dx. \quad (7)$$

Отсюда, после некоторых несложных вычислений окончательно получим зависимость фототока структуры от координаты центра светового пятна:

$$I = \frac{\pi}{2} \frac{eg_n \tau_n D_n}{e^{L_n} - 1} \left\{ e^{-\frac{\eta_0 - l + \frac{\Delta^2}{4L_n^2}}{L_n}} \left[\operatorname{erf} \left(\frac{\eta_0 - l - \frac{\Delta}{2L_n}}{\Delta} \right) + \operatorname{erf} \left(-\frac{\eta_0 + \frac{\Delta}{2L_n}}{\Delta} \right) \right] + \right.$$

$$\left. + e^{\frac{\eta_0 + \frac{\Delta^2}{4L_n^2}}{L_n}} \left[\operatorname{erf} \left(\frac{\eta_0 + \frac{\Delta}{2L_n}}{\Delta} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{\eta_0 - l + \frac{\Delta}{2L_n}}{\Delta} \right) \right] \right\}, \quad (8)$$

где

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt. \quad (9)$$

Эта зависимость для различных значений отношения ширины p -области к диффузионной длине электронов представлена на рис.2. Как и следовало ожидать, при $\eta_0 = l/2$ в симметричной структуре фототок отсутствует. Видно также, что при условии $l \leq L_n$ фотоотклик рассматриваемого поперечного фотодиода является знакопеременным и характеризуется линейной зависимостью от смещения пятна вдоль поверхности базовой области. Такие зависимости наблюдались в [4] при экспериментальном исследовании фототока, индуцированного в двумерной p - n пучком. Испол оценить коорди при скорости с как на экспери

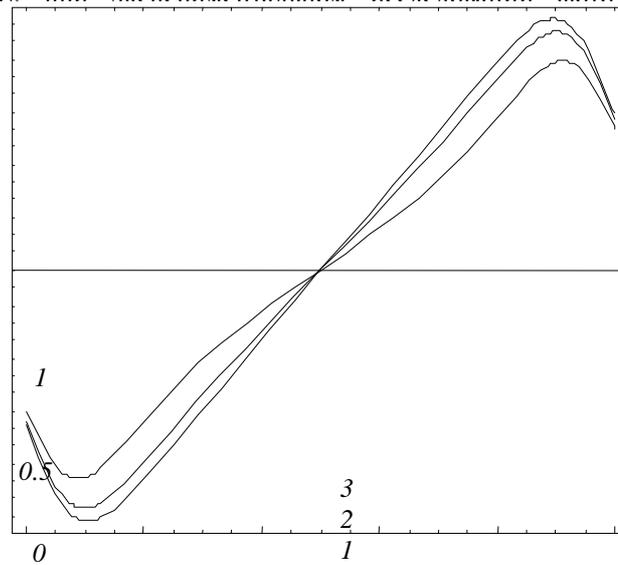


Рис.2. Зависимость фототока для различных значений отношения ширины p -области к диффузионной длине электронов

Фототок (отн. ед.)
фототок (отн. единицы)

фокусированным лазерным пучком на основе выражения (8) экспериментом. Такая оценка фототока составляет 3.6 нА/мкм, в то время как на эксперименте фототок в центре оптического пятна

3. Заключение

Таким образом, теоретический расчет показывает, что при локальном возбуждении двумерных *p-p-p*-структур фокусированным оптическим лучом возникает поперечный фотоэффект, величина и знак которого зависит от положения светового пятна на поверхности структуры. Линейность характеристики открывает новые возможности для создания сенсоров смещения, обладающих высокой координатной чувствительностью и имеющих большую фоточувствительную поверхность. Координатная чувствительность двумерных *p-p-p*-структур более чем на два порядка превосходит чувствительность известных позиционно-чувствительных кремниевых детекторов на основе барьеров Шоттки [5].

В заключение заметим, что создавая в плоскости двумерного электронного газа четыре *p-p*-перехода, расположенных попарно взаимно перпендикулярно, можно осуществить фотодетектор, чувствительный по отношению к смещениям светового пятна вдоль координатных осей *x* и *y*.

Работа выполнена в рамках целевой научной программы РА "Полупроводниковая наноэлектроника".

ЛИТЕРАТУРА

1. **D.Reuter, C.Meier, C.Riestestal, A.D.Wieck.** *Semicond. Sci. Technol.*, **17**, 585 (2002).
2. **D.Reuter, C.Werner, A.D.Wieck, S.Petrosyan.** *Appl. Phys. Lett.*, **86**, 162110 (2005).
3. **D.Reuter, C.Werner, C.Riedesel, A.D.Wieck, D.Schuster, W.Hansen.** *Physica E*, **22**, 725 (2004).
4. **D.Reuter, C.Riestestal, C.Werner, A.D.Wieck, D.Schuster, W.Hansen, S.Petrosyan.** *Proc. Int. Conf. on Semicond. Micro- and Nanoelectronics, Aghveran, Armenia, 2005*, p.127.
5. **J.Henry, J.Livingstone.** *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **37**, 3180 (2004).
6. **E.Fortunato, D.Brida, I.Ferreira, H.Aguas, P.Nunes, R.Martins.** *Thin Solid Films*, **383**, 310 (2001).
7. **Б.Будак, А.Самарский, А.Тихонов.** *Сборник задач по математической физике.* М., Наука, 1972.

ՖՈՎՈՒՍԱՑՎԱԾ ՕՊՏԻԿԱԿԱՆ ՓՆՋՈՎ ՄԱԿԱԾՎԱԾ ՖՈՏՈՆՆՍԱՆՔԸ ԵՐԿՉԱՓ *p-p-p*-
ԿԱՌՈՒՑՎԱԾՔՈՒՄ

Մ.Ս. ՄԱՀԱԿՅԱՆ, Մ.Գ. ՊԵՏՐՈՍՅԱՆ

Տեսականորեն ուսումնասիրված է երկչափի էլեկտրոնային գազի վրա հիմնված *p-p-p*-կառուցվածքում լայնական ֆոտոհոսանքի առաջացումը՝ պայմանավորված ֆոկուսացված օպտիկական փնջի ազդեցությամբ: Ցույց է տրված, որ մակաձված ֆոտոհոսանքի մեծությունն ու ուղղությունը կախված են օպտիկական փնջի կենտրոնի կոորդինատներից: Պարզաբանված են այն պայմանները, որոնց դեպքում այդ կախվածությունն ունի գծային բնույթ, ինչը հաստատում է երկչափ երկբևեռ կառուցվածքների հեռանկարայնությունը տարածական մեծ լուծողական ուժով օժտված կոորդինատա-զգայուն դետեկտորների համար:

*LASER-BEAM-INDUCED CURRENT
IN TWO DIMENSIONAL n-p-n-STRUCTURES*

M.S. SAHAKYAN, S.G. PETROSYAN

The photocurrent induced by a focused optical beam in a p-n-p-structure based on two-dimensional electron gas is studied theoretically. It is shown that the magnitude and sign of the photocurrent depend on the coordinate of the center of a light spot. Conditions for the linearity of such dependence are found which clearly demonstrate the suitability of two-dimensional bipolar structures for use in position-sensitive detectors with high a spatial resolution.

УДК 629.7

ВЛИЯНИЕ ТЕПЛООВОГО ЭФФЕКТА НА ЭФФЕКТИВНОСТЬ СОЛНЕЧНОГО ЭЛЕМЕНТА

Ф.В. ГАСПАРЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 27 декабря 2006 г.)

Представлены результаты теоретического расчета тока короткого замыкания и напряжения холостого хода солнечного элемента на основе *p-n*-перехода с учетом термоэдс, возникающей в результате разницы температур передней и тыльной поверхностей элемента. Показано, что учет термического движения фотогенерированных носителей приводит к увеличению коэффициента собирания. Расчеты показывают, что при интенсивности излучения 5×10^{20} фотон/см²с и при температурном градиенте $\sim 30-40^\circ\text{C}$ для кремниевых солнечных элементов напряжение холостого хода возрастает почти на 6–7%, а ток короткого замыкания – на 40–50%.

1. Введение

Проблема увеличения эффективности полупроводниковых солнечных элементов (СЭ) обсуждается уже много лет. Предложены много новых материалов, различные конструктивные и технологические пути и решения, а также новые физические принципы для увеличения тока короткого замыкания J_{SC} , напряжения холостого хода U_{OC} и коэффициента заполнения [1-11]. В настоящее время значение коэффициента заполнения доходит до 0,80–0,85. Значение U_{OC} ограничено выбором полупроводникового материала. Для увеличения J_{SC} *p-n*-переход создается ближе к поверхности (на глубине 0,3–0,5 мкм), что приводит к уменьшению рекомбинационных потерь неосновных носителей тока, созданных солнечным излучением. Ясно, что создание тонкого поверхностного слоя – трудная задача (см., например, [9]).

Настоящая работа посвящена теоретическому исследованию тока короткого замыкания и напряжения холостого хода солнечного элемента на основе *p-n*-перехода с учетом термоэдс, возникающей в результате разницы температур передней и тыльной поверхностей элемента.

Ниже используется линейная зависимость температуры T вдоль *p-n*-солнечного элемента (рис.1): $T(x) = T_F - \xi x$, где T_F и T_B – температуры, соответственно, передней и тыльной поверхностей, x – координата, ξ – параметр, описывающий температурный градиент.

Расчет U_{OC} и J_{SC} проводится с учетом того, что фотогенерированные

носители заряда разделяются и собираются как с помощью диффузии, так и благодаря температурному градиенту. Метод расчета U_{OC} и J_{SC} обычный: а) решение дифференциальных уравнений для стационарного распределения неравновесных концентраций носителей заряда в квазинейтральных областях вблизи p - n -перехода; б) определение U_{OC} и J_{SC} из условия равенства нулю полного тока.

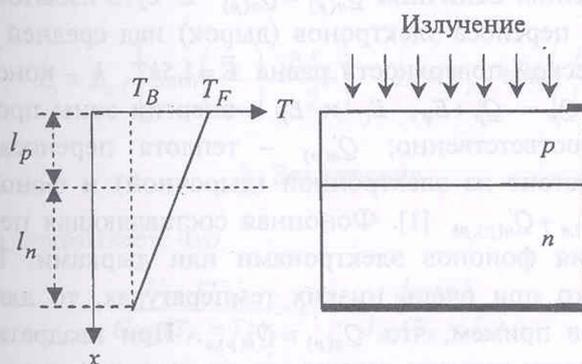


Рис.1. Температурный градиент и схематический вид СЭ.

2. Модель расчета

Модель p - n -перехода ограничена следующими приближениями. 1) Толщина области перехода очень мала по сравнению с размерами p - и n -областей, а также диффузионных длин неосновных носителей. Следовательно, можно пренебречь рекомбинацией носителей заряда в области p - n -перехода. 2) Электростатическое поле ограничено в узком слое перехода. Следовательно, потоки дырок и электронов в n - и p -материалах регулируются диффузией и теплом.

Как обычно, уравнения непрерывности для неосновных носителей для электронов в p -области и дырок в n -области в присутствии внешней генерации имеют вид

$$-\frac{1}{e} \frac{\partial J_n}{\partial x} = g(x) - \frac{n - n_p}{\tau_n}, \quad (1)$$

$$\frac{1}{e} \frac{\partial J_p}{\partial x} = g(x) - \frac{p - p_n}{\tau_p}. \quad (2)$$

В уравнениях (1) и (2) n и p – концентрации неравновесных электронов и дырок в p - и n -областях; n_p и p_n – их равновесные значения; J_n и J_p – плотности токов неосновных носителей в p - и n -областях, соответственно; τ_n и τ_p – времена жизни неравновесных электронов и дырок; $g(x)$ – скорость фотогенерации.

В p - и n -областях неосновные носители движутся под воздействием диффузии и температурного градиента. Следовательно [1],

$$J_n = eD_n \frac{\partial n}{\partial x} + \mu_n n Q_n^* \frac{1}{T} \frac{dT}{dx}, \quad (3a)$$

$$J_p = -eD_p \frac{\partial p}{\partial x} - \mu_p p Q_p^* \frac{1}{T} \frac{dT}{dx}, \quad (3б)$$

где μ_n , μ_p и D_n , D_p – подвижности и коэффициенты диффузии электронов и дырок, соответственно. Величина $Q_{n(p)}^* = Q_{n(p)} - \bar{E}$ суть избыток средней кинетической энергии переноса электронов (дырок) над средней энергией \bar{E} , которая для сферической поверхности равна $\bar{E} = 1,5kT$, k – константа Больцмана; $Q_n = Q_n' - E_C$, $Q_p = -Q_p' + E_V$, E_C и E_V – энергии зоны проводимости и валентной зоны, соответственно; $Q_{n(p)}'$ – теплота переноса электронов (дырок), которая состоит из электронной (дырочной) и фононной составляющих: $Q_{n(p)}' = Q_{n(p),e}' + Q_{n(p),ph}'$ [1]. Фононная составляющая переноса тепла зависит от увлечения фононов электронами или дырками. Так как этот эффект важен только при очень низких температурах, то для упрощения дальнейших расчетов примем, что $Q_{n(p)}' \equiv Q_{n(p),e}'$. При квадратичном законе дисперсии и зависимости времени релаксации от энергии в виде $\tau \sim E^r$ имеем $Q_{n,e}' = (2,5+r)kT$. При рассеянии носителей заряда на тепловых колебаниях решетки имеем $r = -1/2$, а при рассеянии на ионизированных примесных атомах $r = 3/2$. При смешанной проводимости можно принять $2kT < Q_{n,e}' < 4kT$. В дальнейшем при численных расчетах используется $Q_{n,e}' \equiv Q_{p,e}' = 3kT$. Тогда $Q_n^* = 1,5kT - E_C$ и $Q_p^* = -4,5kT + E_V$. Если энергия рассчитывается от валентной зоны ($E_V = 0$), то $E_C = E_g$, где E_g – энергия запрещенной зоны. Следовательно, $Q_n^* = 1,5kT - E_g$ и $Q_p^* = -4,5kT$.

Выражение для напряжения холостого хода, как обычно, можно определить из условия равенства нулю полного тока $J = J_n + J_p$. Для определения J_n и J_p необходимо знать функции $n(x)$ и $p(x)$, которые можно определить из дифференциальных уравнений, получаемых подстановкой выражений (3) в (2). При наличии температурного градиента имеем:

$$\frac{d^2(n - n_p)}{dx^2} - \xi_{n,T} \frac{d(n - n_p)}{dx} - \frac{n - n_p}{L_{n,T}^2} = \frac{n_p}{L_1^2}, \quad (4)$$

$$\frac{d^2(p - p_n)}{dx^2} - \xi_{p,T} \frac{d(p - p_n)}{dx} - \frac{p - p_n}{L_{p,T}^2} = \frac{p_n}{L_2^2}. \quad (5)$$

В (4) и (5) использованы следующие обозначения:

$$\xi_{n,T} = \frac{\xi \mu_n Q_n^*}{eTD_n}, \quad \xi_{p,T} = \frac{\xi \mu_p Q_p^*}{eTD_p}, \quad \frac{1}{L_1^2} = \frac{\xi^2 \mu_n Q_n^*}{eT^2 D_n}, \quad \frac{1}{L_2^2} = \frac{\xi^2 \mu_p Q_p^*}{eT^2 D_p},$$

$$\frac{1}{L_{n,T}^2} = \frac{1}{D_n \tau_n} \left(1 + \frac{\xi^2 \mu_n \tau_n Q_n^*}{eT^2} \right), \quad \frac{1}{L_{p,T}^2} = \frac{1}{D_p \tau_p} \left(1 + \frac{\xi^2 \mu_p \tau_p Q_p^*}{eT^2} \right).$$

Уравнения (4) и (5) решены с использованием известных граничных условий [1].

Определив функции $n(x)$ и $p(x)$, подставляя их в выражение для полного тока через p - n -переход и приравнявая его нулю, находим

$$U_{OC} = \frac{kT(x)}{e} \ln \left[1 + \frac{eg_0(L_1 + L_2)}{eg_n L_3 + eg_p L_4} \right], \quad J_{SC} = eg_0(L_1 + L_2).$$

Здесь g_0 – скорость генерации фотоносителей в p - n -переходе, $g_n = n_p / \tau_n$, $g_p = p_n / \tau_p$,

$$L_3 = L_{n,T} \left[\tanh \left(\frac{l_p}{L_n} \right) - \frac{\xi L_n}{2} \right], \quad L_4 = L_{p,T} \tanh \left(\frac{l_n}{L_p} \right).$$

3. Заключение

Анализ показывает, что

$$\frac{U_{OC}(T)}{U_{OC}(T_F = T_B)} > 1, \quad \frac{J_{SC}(T)}{J_{SC}(T_F = T_B)} > 1.$$

На рис.2-5 показаны зависимости напряжения холостого хода и тока короткого замыкания от температуры и интенсивности излучения для СЭ на основе кремния при следующих значениях параметров [12]: $L_n = 10$ мкм, $L_p = 8$ мкм, $l_n = 20$ мкм, $l_p = 10$ мкм, $E_g(T) = 1,21 + [(1,21T - 4,1 \times 10^{-4} T^2) / (T - 300)]$ эВ, $\mu_n = 4 \times 10^9 T^{-2,6}$ см²/Вс, $\mu_p = 4 \times 10^8 T^{-2,3}$ см²/Вс, $n_i = \sqrt{1,5 \times 10^{33} \exp(-E_g(T)) / kT}$ см⁻³, $\rho = 0,4$ Ом см. Из рис.2-5 следует, что с ростом разницы температур передней и тыльной поверхностей (в области от 300 К до 340 К) напряжение холостого хода медленно увеличивается примерно на 6–7%, а величина тока короткого замыкания возрастает сильнее – более чем на 50%. Ясно, что такой существенный рост тока короткого замыкания может быть обусловлен ростом коэффициента собирания фотогенерированных носителей. Таким образом, поддерживая тыльную поверхность фотовольтаической панели настолько холодной, насколько это возможно, можно увеличить эффективность термо-фотовольтаического солнечного элемента.

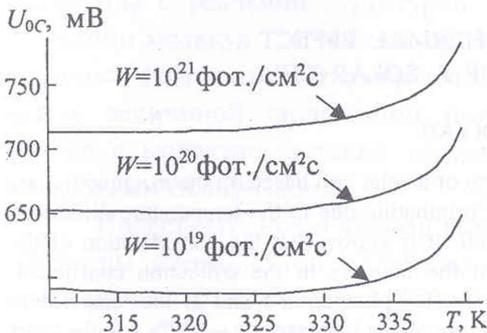


Рис.2. Температурная зависимость напряжения холостого хода.

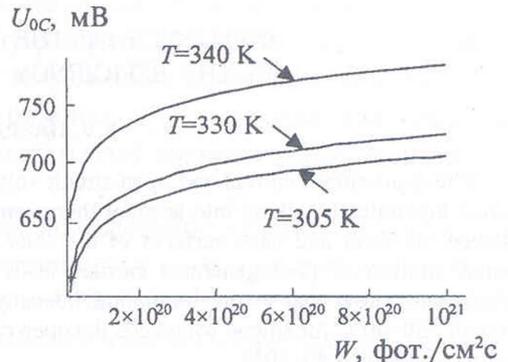


Рис.3. Зависимость напряжения холостого хода от интенсивности излучения.

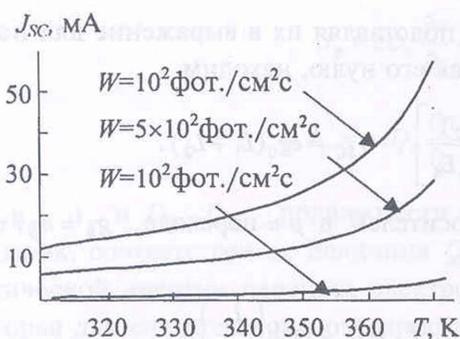


Рис.4. Температурная зависимость тока короткого замыкания.

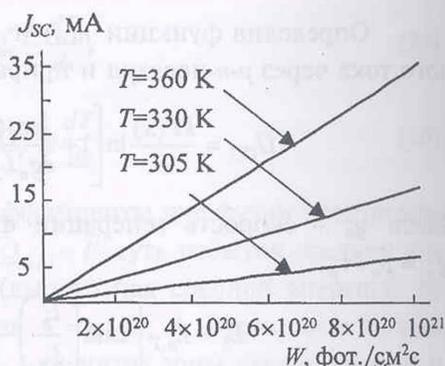


Рис.5. Зависимость тока короткого замыкания от интенсивности излучения.

Данная работа выполнена при финансовой поддержке гранта CRDF ARP2-2678-YE-05.

ЛИТЕРАТУРА

1. A.L.Fahrenbruch, R.H.Bube. Fundamentals of Solar Cells. N.Y., Acad. Press, 1983.
2. M.D.Archer, J.R.Bolton, S.T.C.Siklos. Solar Energy Materials and Solar Cells, **40**, 133 (1996).
3. F.V.Gasparyan, V.M.Aroutiounian, P.Soukiassian. Proc. of World Renewable Energy Congress VII, 2002, Cologne, Germany (WREC-2002), p.56.
4. V.M.Aroutiounian, F.V.Gasparyan. Proc. SPIE Solar and Switching Materials, **4458**, 77 (2001).
5. W.Wettling. Solar Energy Materials and Solar Cells, **38**, 487 (1995).
6. A.V.Shah, R.Platz, H.Keppner. Solar Energy Materials and Solar Cells, **38**, 501 (1995).
7. A.G.Aberle, P.P.Altermatt, G.Heiser, S.J.Robinson, A.Wang, J.Zhao, U.Krumbein, M.A.Green. J. Appl. Phys., **77**, 3491 (1995).
8. H.Wagner. Phys. stat. solidi (b), **192**, 229 (1995).
9. Y.Tonomura, M.Hagino, H.Washio, M.Kaneiwa, T.Saga, O.Anzawa, K.Aoyama, K.Shinozaki, S.Matsuda. Solar energy materials and solar cells, **66**, 551 (2001).
10. L.L.Kazmerski. Renewable and Sustainable Energy Reviews, **1**, 71 (1997).
11. M.A.Green. Silicon Solar Cells: Advanced Principles and Practice. Sydney, Bridge Printery, 1995.
12. Таблицы физических величин. Под ред. И.К.Кикоина, М., Атомиздат, 1976.

INFLUENCE OF THE THERMAL EFFECT ON THE EFFICIENCY OF A SOLAR CELL

F.V. GASPARYAN

The short-circuit current and open-circuit voltage of a solar cell based on the *p-n* junction are studied theoretically, taking into account thermoemf originating due to the temperature difference between the front and back surfaces of the solar cell. It is shown that the consideration of the thermal motion of photogenerated carriers leads to the increase in the collection coefficient. Calculations show that at the irradiation intensity 5×10^{20} photon/cm²s and at the temperature gradient ~ 30 – 40°C for silicon solar cells the open circuit voltage increases by ~ 6 – 7% and the short circuit current by ~ 40 – 50% .

УДК 532.783

МОЛЕКУЛЯРНАЯ СТРУКТУРА И ФИЗИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ НЕКОТОРЫХ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ

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

Институт прикладных проблем физики НАН Армении, Ереван

(Поступила в редакцию 29 ноября 2006 г.)

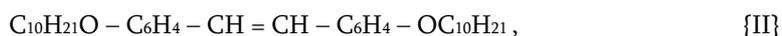
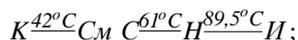
Проведено исследование термодинамических свойств и спонтанной поляризации в сегнетоэлектрических ЖК системах (С*ЖК): смектик С матрица + хиральная добавка (ХД). Установлен факт существования оптимальной концентрации ХД, при которой исследуемая С*ЖК система обладает наибольшей величиной спонтанной поляризации, и концентрации ХД, при которой происходит фазовый переход хиральной наклонной смектик С фазы в смектик А фазу. Рассчитаны кривые температурной зависимости свободной энергии, конфигурационной энергии, удельной теплоемкости, ориентационного параметра порядка в температурном интервале существования жидкокристаллических мезофаз, хорошо передающие экспериментально наблюдаемые тенденции изменения свойств С*ЖК.

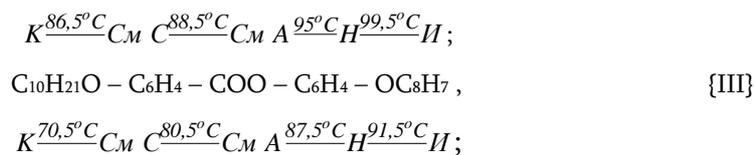
Многокомпонентные сегнетоэлектрические жидкокристаллические (С*ЖК) системы в настоящее время являются предметом тщательного научного исследования и компонентом многочисленных практических разработок.

Феноменологическая теория спонтанной поляризации хотя и объясняет связь между спонтанной поляризацией, углом наклона, шагом спирали и временем релаксации, однако развитая теория не связывает перечисленные параметры с реальной структурой молекул, не учитывает изменений конформации молекул, в частности, внутреннего вращения отдельных молекулярных фрагментов. Это исключает возможность установления корреляции между величиной спонтанной поляризации P_s и местом расположения диполя в молекуле, а также затрудняет расчет молекулярных констант по измерениям поляризации.

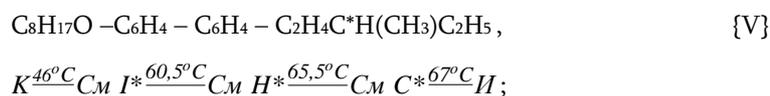
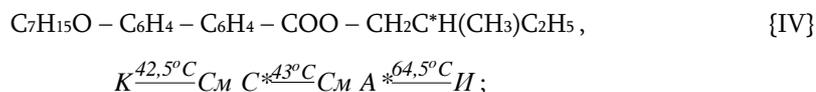
Представленное в данной работе исследование влияния молекулярной структуры компонентов С*ЖК на величину P_s (чем обусловлено быстрое действие электрооптического отклика в С*ЖК материале) и на термодинамические свойства ЖК систем представляет практический интерес, поскольку дает возможность варьирования параметров ЖК материалов и их оптимизации.

В качестве объектов исследования были выбраны: смектические СЖК (СмЖК):

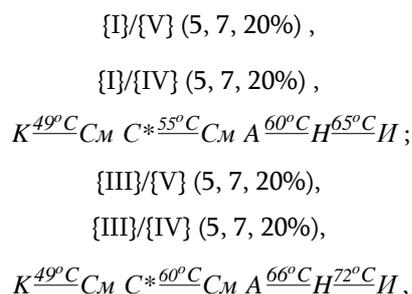




сегнетоэлектрические смектические С*ЖК:



смеси:



где K – твердый кристалл; См(А,С,І,Н) – смектические А, С, І, Н-фазы, соответственно; Н – нематическая фаза; * – означает хиральную структуру молекул, І – изотропная жидкая фаза.

Измерения спонтанной поляризации проводились по осциллограммам переполяризации в переменном электрическом поле на частоте 80 Гц на образцах с гомеотропной ориентацией, в которых толщина исследуемого слоя ЖК составляла 20 мкм.

На рис.1 представлены результаты измерений температурной и концентрационной зависимостей спонтанной поляризации для различных ЖК систем. Сравнивая эти значения P_s для смесей с ранее полученными данными [1] для P_s индивидуальных ЖК {III},{I},{II},{V},{IV}, которые составляли 2.2÷3.5 нКл/см², становится ясным, что исследуемые смеси обладают на порядок большей величиной спонтанной поляризации. Значительно шире у смесей и температурный интервал существования сегнетоэлектрической фазы.

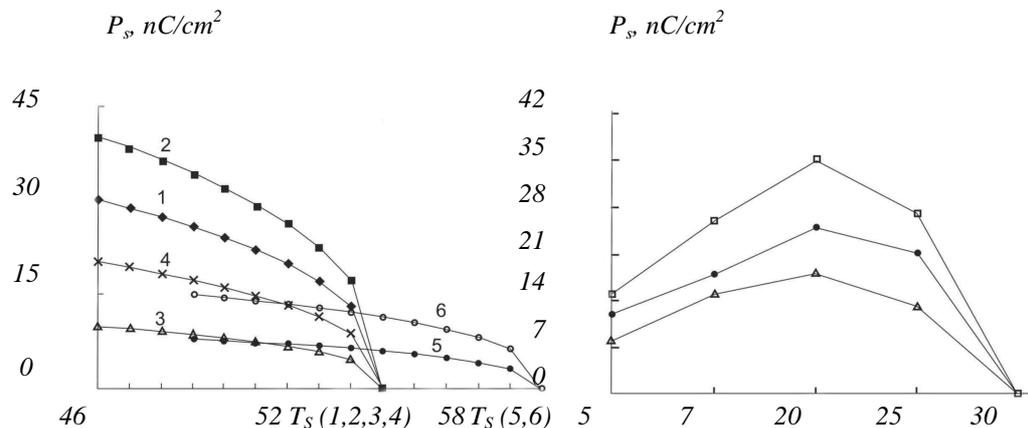


Рис.1. Температурные (а) и концентрационные (б) зависимости спонтанной поляризации в бинарных системах: 1 – {I}/{V}(5%), 2 – {I}/{V}(20%), 3 – {I}/{IV}(5%), 4 – {I}/{IV}(20%), 5 – {III}/{IV}(5%), 6 – {III}/{IV}(20%).

На основании экспериментальных результатов по измерению P_s , исходя из того, что $|P_s| \propto \omega \propto |T_c + T|^\beta$ [2] (ω – истинный параметр перехода СмС – СмА, T_c – температура перехода, β – критический показатель), нами оценен критический показатель $\beta = 0.38 \pm 0.02$. Расхождение в значениях β , полученных в работе и предсказанных теорией среднего поля [3] ($\beta \approx 0.5$), указывает на то, что в исследованных системах сегнетоэлектрическое упорядочение вызвано взаимодействиями, имеющими короткодействующий характер, в частности, стерическими и дисперсионными. С точки зрения стерических факторов, играющих существенную роль в процессе спонтанной поляризации, наиболее важной является конформация жестких остовов молекул СмС матриц. Важность стерической структуры остова молекулы обусловлена тем, что, во-первых, от этой структуры зависит заторможенность вращения молекул вокруг их длинных осей, что приводит к некоторому упорядочению коротких осей молекул. А если молекула обладает дипольным моментом d_{\perp} , направленным вдоль той ее короткой оси, которая испытывает упорядочение, то появляется нескомпенсированный дипольный момент смектического слоя, т.е. макроскопическая спонтанная поляризация слоя. Во-вторых, эта структура также обуславливает распределение электронной плотности в молекуле, что, в свою очередь, влияет на величину компонента дипольного момента d_{\parallel} , т.е. также приводит к изменению P_s исследуемого объекта в целом.

Величина P_s , индуцированная хиральной добавкой, во всех исследуемых системах возрастает с повышением концентрации добавки и достигает максимума при ее определенной концентрации (~20%). Дальнейшее повышение концентрации, наоборот, приводит к уменьшению величины P_s в системе.

Для интерпретации полученных экспериментальных результатов нам было важно рассмотреть и отобрать по возможности простую модель, которая, с одной стороны, отражала бы основные, наиболее существенные параметры реальной системы и, с другой – позволяла бы качественно (а в некоторых случаях количественно) воспроизвести основные макроскопические свойства ЖК данного типа.

Введение концепции кластерного строения, согласно которой в мезофазе образуются высокоорганизованные молекулярные группы, позволяет преодолеть противоречия, возникающие

в теориях, не учитывающих возможность локальной самоорганизации молекул в анизотропной среде. В [4], где был проведен анализ межмолекулярного взаимодействия, нами показана возможность образования в ЖК {IV}, {I}, {III}, {V} и {II} энергетически выгодных молекулярных ассоциатов – димеров. Было установлено, что для {IV}{IV}, {V}{V} и {I}{V} наиболее выгодным является антипараллельная $\uparrow\downarrow$ (по отношению дипольных моментов d_{\perp} вдоль длинных осей) упаковка молекул. В случае же {I}{I} и {I}{IV} взаимодействий как параллельное $\uparrow\uparrow$, так и $\uparrow\downarrow$ расположения молекул энергетически одинаково выгодны (разность энергии взаимодействия между двумя молекулами $E_{\uparrow\uparrow} - E_{\uparrow\downarrow} \approx 0.8$ (ккал/моль)). Расчеты в [4] показали также, что в системах {I}{V}, {I}{IV} и {III}{IV} энергетически наиболее выгодно образование смешанных ассоциатов. Причем следует отметить, что если продольные составляющие дипольных моментов молекул димера направлены в противоположные стороны и вследствие этого почти полностью компенсируют друг друга, то направления поперечных составляющих в основном совпадают [4]. В связи с этим направление суммарного дипольного момента пары молекул димера ($d_{\perp} \approx 5.0 \div 6.0 D$) почти перпендикулярно длинной оси.

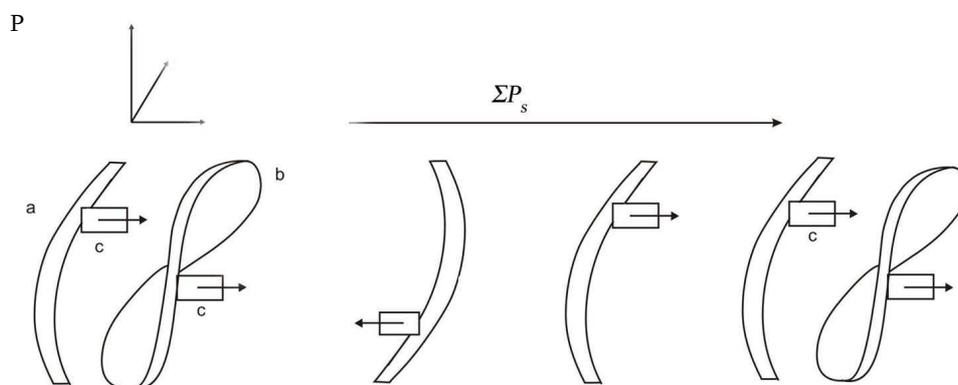


Рис.2. Димерная модель увеличения спонтанной поляризации в смектическом слое: а – молекула смектической матрицы, б – молекула хиральной добавки, с – поперечная полярная группа, \mathbf{n} – направление директора, направление z перпендикулярно к плоскости.

Исходя из вышеизложенного, в ЖК системе с повышением концентрации хиральной добавки относительное количество смешанных димеров с антипараллельным расположением молекул увеличивается. Следовательно, в димерах возникает антисегнетоэлектрический ближний порядок расположения диполей молекул смектической матрицы и хиральной добавки, в результате чего d_{\perp} , связанные с полярными группами COO, OH, C*H₃, складываются, что приводит к увеличению суммарного дипольного момента в смектических слоях С*ЖК. Димерная модель увеличения спонтанной поляризации в смектическом слое представлена на рис.2. Однако, как видно из рис.1, при концентрациях хиральной добавки $c > 20-25\%$ значение P_s уменьшается и при $c = 30\%$ полностью исчезает. Такое поведение P_s объясняется тем, что дальнейшее увеличение d_{\perp} в зависимости от концентрации хиральной добавки ($c > 20-25\%$) приводит к сильному уменьшению угла наклона молекул ω к смектическим слоям. Уменьшение ω , в свою очередь, приводит к уменьшению, а затем и к исчезновению P_s в исследуемых средах. Эта картина также находится в соответствии с экспериментальными результатами [5], где показано, что при $c \approx 25\%$

температурный интервал существования хиральной наклонной смектической фазы сужается по сравнению с температурным интервалом мезофазы при 20%-ой концентрации добавки, и при $c = 30\%$ хиральная наклонная СмС фаза переходит в СмА фазу.

Для данных объектов исследования во всем температурном интервале существования мезофаз рассчитаны зависимости термодинамических параметров от приведенной температуры τ ($\tau = T/T_b$, где T_b – температура просветления) и состава ЖК системы.

Анализ различных форм и методов исследования структурных и термодинамических свойств ЖК привел к выводу о целесообразности применения метода, сочетающего классическую модель [6] в качестве приближения для учета эффектов ближнего порядка и модель гауссового перекрытия [7] в качестве приближения для межкластерного взаимодействия.

В качестве “элементарного” объекта рассматривались не одиночные молекулы, а микрокластеры, состоящие из двух молекул – димеры. Здесь следует отметить, что отдельные молекулы {IV}, {I}, {V} и {II} обладают заметной двуосностью, так как жесткие ядра образованы бензольными кольцами, имеющими существенно различную ширину ($\sim 5\text{E}$) и толщину ($\sim 3\text{A}$). Что касается формы димеров, то они более эллипсоидальные, чем составляющие их одиночные молекулы [8]. Длины осей эллипсоидов в продольном (σ_{\parallel}) и поперечном (σ_{\perp}) направлениях выбраны в соответствии с данными о геометрии димеров, установленными нами в атом–атомном приближении [8], причем выбор модельного параметра σ_{\perp} проводился, исходя из корректного учета “исключенного” димером объема.

Методом Монте-Карло с помощью канонического NVT -ансамбля (N – количество эллипсоидальных молекул-димеров, V – объем системы, T – температура системы) рассматривалась система из 125 эллипсоидов вращения, взаимодействующих между собой согласно специально сконструированному потенциалу Леннарда–Джонса [9]. В расчетах учитывался также вклад от диполь–дипольного взаимодействия W_{dd} , поскольку молекулы исследуемых соединений из-за наличия сильнополярных групп ($-\text{O}-$, OH , $\text{CH}=\text{N}$, COO) обладают значительным дипольным моментом (4.2 – 5.3 D).

Расчеты проводились для прямоугольного параллелепипеда с ребрами $L_x = L_y < L_z$ ($L_z/L_x \approx \sigma_{\parallel}/\sigma_{\perp}$), длинное ребро которого параллельно преимущественному направлению длинных осей эллипсоидов. На грани накладывались периодические граничные условия, что позволило резко уменьшить ошибку, связанную с малым числом частиц в основном образце и с влиянием поверхностных эффектов, и изучить по существу бесконечную трансляционно-периодическую систему. Каждая частица имела пять степеней свободы. Положение центров масс задавали тремя декартовыми координатами. Описание вращательного движения частиц осуществляли с помощью двух полярных углов θ и φ ($0 < \theta < 180^\circ$; $0 < \varphi < 360^\circ$). В начальном состоянии центры масс эллипсоидальных частиц располагались полностью упорядоченным образом, а все их оси – строго параллельно друг другу, так что ориентационный параметр порядка $S = 0.5\langle(3\cos^2\theta - 1)\rangle$, где θ – угол между длинной осью эллипсоида и направлением предпочтительной ориентации

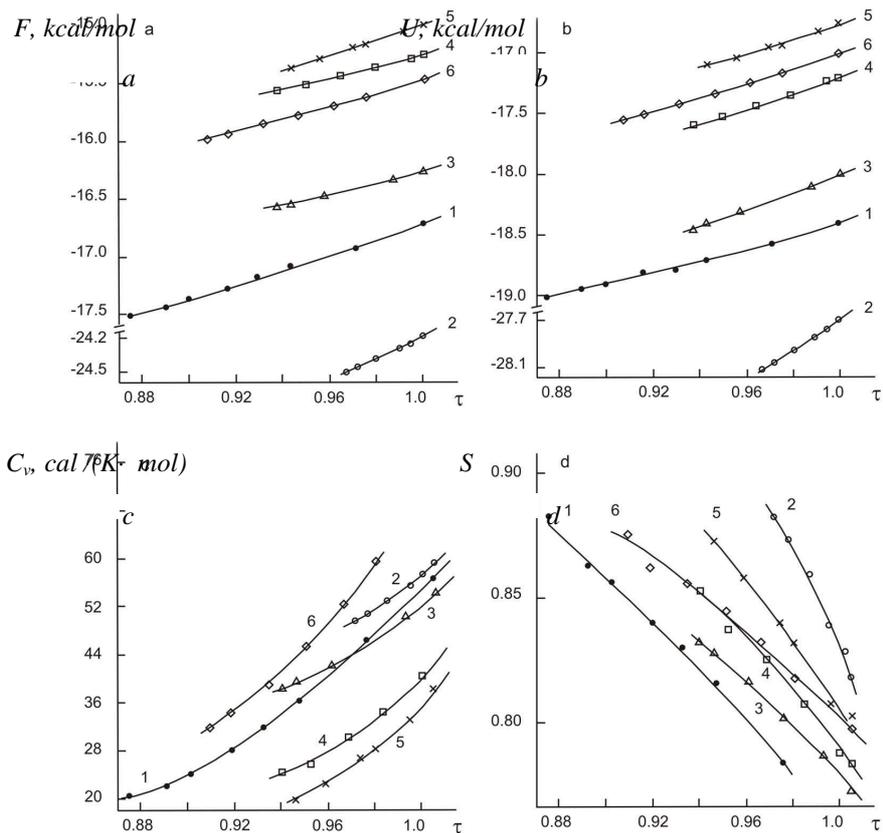


Рис.3. Температурная зависимость свободной энергии F (a), конфигурационной энергии U (b), теплоемкости C_v (c) и параметра порядка S (d): 1 – {I}, 2 – {II}, 3 – {IV}, 4 – {V}, 5 – {I + IV}, 6 – {I + V}.

молекул, в начальном состоянии был равен единице. О достижении равновесия в системе свидетельствовало постоянство средних значений вычисляемых термодинамических функций. Отметим, что конечные результаты получали после усреднения приблизительно по 10^6 конфигурациям

При фиксированной плотности $\eta = 0.45$ ($\eta = V_0 N / V$, где V_0 – объем эллипсоида вращения, V – объем системы, N – число эллипсоидальных частиц – димеров системы) для выбранных объектов исследования рассчитаны кривые зависимости свободной энергии F (рис.3а), конфигурационной энергии U (рис.3б), удельной теплоемкости C_v (рис.3с) и ориентационного параметра порядка S (рис.3д) от приведенной температуры. Как видно из рис.3, результаты расчетов в целом качественно хорошо передают экспериментально наблюдаемые тенденции изменения свойств ЖК-фазы [10]. Результаты расчета в пределах отдельной фазы (сметической или нематической) качественно верно воспроизводят характерные для мезофазы возрастание теплоемкости C_v при низких температурах (см. рис.3с), в то время как в количественном отношении они оказались ниже экспериментального значения [10]. Отметим, что здесь результаты расчетов сравниваются с экспериментальными данными для других соединений, поскольку таковых моделируемых соединений в литературе не имеется. Результаты расчетов для

ориентационного параметра порядка S (рис.3d) несколько завышены по сравнению с экспериментальными данными, особенно в области высоких температур (в ЖК S обычно имеет промежуточную величину, изменяющуюся от значений 0.8 – 0.9 вблизи перехода в твердый кристалл до 0.3 – 0.4 около перехода в изотропную фазу). К аналогичным значениям S приводят также все молекулярные теории, основанные на моделях цилиндрически-симметричных молекул. Причиной такого расхождения является то, что расчеты проводились для систем, состоящих из одноосных эллипсоидов. Как показано в [11], при увеличении двuosности молекул-эллипсоидов параметр порядка S быстро уменьшается, что не учитывалось в используемой модели. Тем не менее согласие экспериментальных и расчетных данных для S можно признать вполне удовлетворительным.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Л.С.Бежанова и др.** Изв. НАН Армении, Физика, **33**, 304 (1998).
2. **П.Де Жен.** Физика жидких кристаллов. М., Мир, 1971.
3. **А.С.Сонин.** Введение в физику жидких кристаллов. М., Наука, 1983.
4. **S.M.Yaloyan, L.S.Bezhanova, E.B.Abrahamyan.** Ferroelectrics, **245**, 147 (2000).
5. **К.К.Варданян.** Влияние внешних воздействий молекулярной структуры вещества на электрические свойства сегнетоэлектрических жидких кристаллов. Диссерт. канд. физ.-мат. наук, Ереван, 1999.
6. **С.Чандрасекар.** Жидкие кристаллы. М., Мир, 1980.
7. **B.S.Berne, P.Pechukas.** J. Chem. Phys., **56**, 4213 (1972)
8. **С.М.Яйлоян, Л.С.Бежанова, Э.Б.Абрамян.** Журн. структурн. химии, **41**, 709 (2000).
9. **A.Ts.Sarkissyan, S.M.Yaloyan.** Mol. Cryst. Liq. Cryst., **241**, 31 (1994).
10. **H.Marynissen, J.Thoen, W.Van Dael.** Mol. Cryst. Liq. Cryst., **97**, 149 (1983).
11. **W.M.Gelbart, B.Barboy.** Mol. Cryst. Liq. Cryst., **33**, 209 (1979).

ՈՐՈՇ ՍԵԳՆԵՏԱԷԼԵԿՏՐԱԿԱՆ ՀԵՂՈՒԿ ԲՅՈՒՐԵՂԱՅԻՆ ՀԱՄԱԿԱՐԳԵՐԻ ՍՈՒԼԵԿՈՒԼԱՅԻՆ ԿԱՌՈՒՑՎԱԾՔԸ ԵՎ ՖԻԶԻԿԱԿԱՆ ՊԱՐԱՄԵՏՐԵՐԸ

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

Կատարված է սեգնետաէլեկտրական հեղուկ բյուրեղային (ՀԲ) համակարգերի ($U^*ZԲ$) սնկտիկ C մատրից + քիրալային ավելցուկ թերմոդինամիկ հատկությունների և սպոնտան բևեռացման հետազոտում: Հաստատված է քիրալային ավելցուկի (ՔԱ) օպտիմալ կոնցենտրացիայի գոյության փաստը, որի դեպքում $U^*ZԲ$ համակարգը ունի սպոնտան բևեռացման ամենամեծ արժեք և ՔԱ-ի այն կոնցենտրացիան, որի դեպքում տեղի ունի փուլային անցում սնկտիկ *C փուլից սնկտիկ A փուլ: Տեսականորեն հաշվված են ազատ էներգիայի, կոնֆիգուրացիոն էներգիայի, տեսակարար ջերմունակության և կարգավորվածության կարգի պարամետրի կախման կորերը հեղուկ բյուրեղական փուլերի գոյության ջերմաստիճանային տիրույթում, որոնք լավ են համապատասխանում փորձնականորեն դիտվող U^* $ZԲ$ -ի առանձնահատկություններին:

*MOLECULAR STRUCTURE AND PHYSICAL PARAMETERS
OF SOME FERROELECTRIC LIQUID CRYSTAL SYSTEMS*

L.S. BEZHANOVA, Z.V. BAGDASARYAN, M.L. BABURYAN

*We investigate the thermodynamic properties and spontaneous polarization of ferroelectric liquid crystal (SmC^*LC) systems: smectic C matrix+chiral adding (ChA). The fact of existence of the optimal concentration of ChA for which the investigated SmC^*LC system has the maximal value of spontaneous polarization and the existence of certain concentration of ChA at which the phase transition of chiral tilted smectic C phase in smectic A phase occurs, is established. The curves of the temperature dependence for the free energy, configuration energy, specific heat, and orientational-order parameter, which are in good agreement with the experimentally observed trends in the changes of the SmC^*LC properties, are obtained.*

УДК 548.732

ЗАВИСИМОСТЬ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ НАНОКОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИСТИРОЛА ОТ ВИДА НАПОЛНИТЕЛЯ И ТЕМПЕРАТУРЫ

А.А. МАРТИРОСЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 13 сентября 2006 г.)

Изучена электропроводность нанокomпозитов на основе полистирола в зависимости от различных наполнителей и температуры. Показано, что добавление алюминия и бронзы приводит к понижению температуры стеклования, а углерода - к последовательному росту проводимости с ростом температуры.

Известно, что полимеры, благодаря своему строению, являются хорошими изоляторами. В то же время они упруги, изнoсоустойчивы, прочны, что делает их незаменимыми в качестве многих изделий в технике и в различных областях народного хозяйства. Однако в настоящее время методом введения в полимерную матрицу различных наполнителей получены новые материалы - так называемые полимерные композиты, обладающие уникальными свойствами, присущими как полимерам, так и проводникам и полупроводникам [1,2]. Эти свойства еще более расширили области их применения. К примеру, металлонаполненные полимерные материалы могут быть использованы для изготовления проводящих лент, проволоки, термисторов [3], термоэлементов [4]. Еще более интересны по своим свойствам нанокomпозиты (структурированные материалы со средним размером одной из фаз менее 100 нм. Эти материалы привлекают внимание свойствами входящих в их состав кластеров, образованных разным количеством атомов металла или полупроводника. Добавление в полимерную матрицу наночастиц приводит к возникновению новых свойств композиций.

Ранее нами исследована зависимость удельного сопротивления полихлоропрена и полистирола от температуры [5]. Добавление небольшого количества проводящего вещества в полимерную матрицу приводило к резкому возрастанию проводимости. Ввиду этого целью настоящей работы было изучить зависимость удельной электропроводности нанокomпозитов, полученных добавлением алюминиевого, бронзового и углеродного порошков в полистироловую матрицу, от температуры среды.

Образцы получались методом растворения полистирола (ПС) в дихлорэтaне, добавлением порошков алюминия, бронзы и углерода в раствор и выпариванием при комнатной температуре. Весовые пропорции матрицы и наполнителя были равны 1:0,5, соответственно. До загустения растворы постоянно размешивались. После выпаривания пленки отделялись, промывались водой

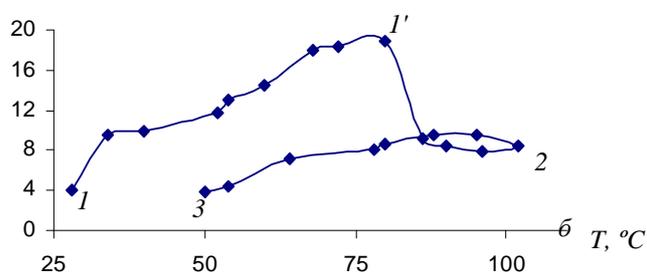
и высушивались на воздухе. Удельное сопротивление образцов определялось тераомметром Е6-13А. Использовались омические контакты. Рентгенограммы от образцов получали на камере РКСО излучением CuK_{α} . Для определения размеров частиц использованных порошков анализировались кривые интенсивности дифракционных линий полученных рентгенограмм. Помещая образцы в термоустановку и нагревая от комнатной температуры до 90-100°C, определяли значения электросопротивления.

Зависимость удельного сопротивления композитов от температуры приведена на рис.1а,б,в, при ее росте (кривая 1-2) и понижении (кривая 2-3). Размеры частиц вводимых порошков определялись рентгенографически методом определения полуширины дифракционной линии [7,8] по формуле $L = 0.9\lambda / \beta \cos \vartheta$ с введением поправки пересчета миллиметров на радианы. Расчеты показали, что размеры частиц вводимых порошков находятся в пределах 5-10 нм.

Из рис.1а (ПС с алюминием) следует, что при повышении температуры до 60°C наблюдается рост удельного сопротивления (1-1'), а последующий рост температуры приводит к его уменьшению. Для ПС с бронзовым наполнителем (рис.1б) рост удельного сопротивления продолжается до 80°C, а затем идет значительный спад (кривая 1'-2). Можно утверждать, что добавление алюминия и бронзы в матрицу приводит к уменьшению температуры стеклования ($T_{ст}$ полистирола $\sim 100^\circ C$). Известно [6], что повышение температуры полистирола приводит к деструкции главной цепи, появляются свободные радикалы с неспаренными электронами. При этом частицы и алюминия, и бронзы могут взаимодействовать с появившимися радикалами, образуя как ионные, так и водородные связи. Усиливаются взаимодействия между звеньями макромолекул и очевидно, что это взаимодействие больше в композитах с алюминиевым наполнителем, чем с бронзовым (ср. $T_{ст}$ для алюминия 60°C, а для бронзы (80°C). Это в свою очередь приводит к уменьшению подвижности звеньев и, следовательно, к понижению $T_{ст}$.

Понижение температуры от 100°C и ниже (кривая 2-3) приводит к увеличению удельного сопротивления, однако при тех же температурах это значение ниже (рис.1а,б,в).

Своеобразно поведение нанокompозитов полистирола с углеродным наполнителем (рис.1в). С повышением температуры до 100°C и выше наблюдается последовательный рост проводимости. Такое поведение согласуется с результатами исследований Б.Весслинга [9], согласно которым добавление углеродного порошка в раствор полистирола приводит к образованию вокруг углеродных частиц оболочек из макромолекул матрицы. При увеличении температуры с ростом подвижности макромолекулярных звеньев возникшие трубчатые оболочки, так называемые хлопьевидные частицы (floculated particles) все больше стыкуются друг с другом, что и приводит к увеличению проводимости.



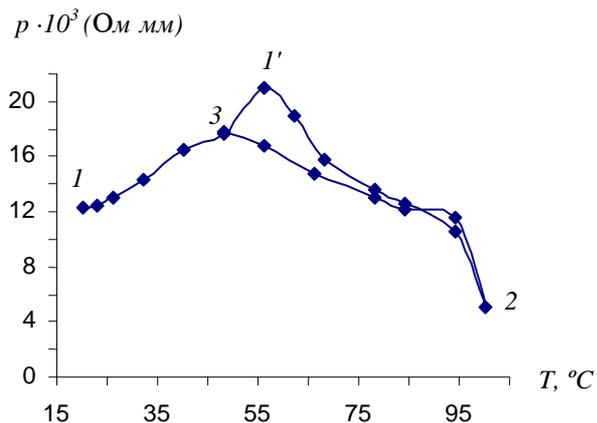
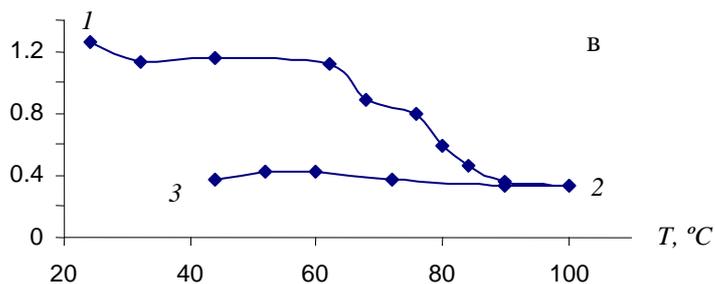


Рис.1. Зависимость удельного сопротивления от температуры (при росте температуры - отрезок 1-2, при понижении - 2-3) для композиций на полистироловой основе: а) с алюминиевым наполнителем, б) с бронзовым, в) с углеродным.

Энергия активации композитов, рассчитанная из зависимости $\lg \rho$ от $1/T$ (отрезок кривой 1-1') [6], для ПС с алюминием и бронзой равна 1,4 эВ, а для ПС с углеродом 2,25 эВ (кривая 1-2),



что хорошо согласуется с уменьшением электросопротивления при повышении температуры - для ПС с алюминием и бронзой на 6-8 порядков, а для ПС с углеродом на 4 порядка.

Резюмируя вышеизложенное, можно заключить, что алюминий- и бронзо-содержащие нанокомпозиты на полистироловой матрице снижают температуру стеклования. А электросопротивление углеродосодержащих нанокомпозитов стабильно уменьшается с ростом температуры.

ЛИТЕРАТУРА

1. T.Vossmeier, L.Katsikas, M.Giersig, I.Popovic. J. Chem. Phys., **98**, 7665 (1994).
2. В.М.Неверов, С.Н.Чвалун. Высокмолекуляр. соединения А, **42**, 450 (2000).
3. D.Kersta. J. Pol. Sci., **10**, 447 (1953).
4. И.А.Остряков. Химическая промышленность, **3**, 88 (1959).
5. А.А.Мартirosян, В.Н.Агабекян, А.М.Седракян, П.А.Григорян, Х.А.Исмаил. Изв. НАН Армении, Физика, **40**, 278 (2005).
6. Органические полупроводники, под ред. А.В.Топчиева. М., изд. АН СССР, 1963.
7. Я.С.Уманский. Рентгенография металлов. М., Металлургия, 1969
8. М.А.Мартынов, К.А.Вылегжанина. Рентгенография полимеров, М., Химия, 1972.
9. B.Wessling, H.Volk, W.R.Mathew, V.G.Kullarni. Mol. Cryst. Liq. Cryst., **160**, 205 (1988).

ՊՈԼԻՍՏԻՐՈԼԻ ՀԻՄՔՈՎ ՍՏԱՅՎԱԾ ՆԱՆՈԿՈՄՊՈԶԻՏՆԵՐԻ
ԷԼԵԿՏՐԱՀԱՂՈՐԴԱԿԱՆՈՒԹՅԱՆ ԿԱԽՎԱԾՈՒԹՅՈՒՆԸ
ԼՅՈՆՎԱԾ ՆՅՈՒԹԻ ՏԵՍԱԿԻՑ ԵՎ ՋԵՐՄԱՍՏԻՃԱՆԻՑ

Ա.Հ. ՄԱՐՏԻՐՈՍՅԱՆ

Հետազոտված է պոլիստիրոլի հիմքով նանոկոմպոզիտների էլեկտրահաղորդականությունը կախված տարբեր լցոններից և ջերմաստիճանից: Արդյունքներից հետևում է, որ ալյումինիումի և բրոնզի լցոնները իջեցնում են ապակիացման ջերմաստիճանը, իսկ ածխածնի լցոնը բերում է հաղորդականության հետևողական աճին՝ ջերմաստիճանի աճին զուգընթաց:

DEPENDENCE OF THE CONDUCTIVITY OF POLYSTIROL-BASED NANOCOMPOSITES ON THE TYPE OF FILLERS AND TEMPERATURE

A.A. MARTIROSYAN

The conductivity of nanocomposites on the basis of polystirol depending on different fillers and temperature is investigated. The obtained dependences show that the aluminum and bronze fillers lead to the decrease in the glass-transition temperature, while the carbon leads to the subsequent increase in the conductivity with increasing temprature.

ԲՈՎԱՆԴԱԿՈՒԹՅՈՒՆ

Լ.Ա.Գևորգյան, Լ.Ա.Հովսեփյան. Հարթություններով ուղղորդված պոզիտրոնային թանձրույթի ճառագայթման ձևավորումը միջավայրի անհամասեռության հաշվառմամբ	131
Լ.Ա.Հովսեփյան. Հարթություններով ուղղորդված պոզիտրոնային թանձրույթի ճառագայթած ֆոտոնների սպեկտրի հաշվարկը միջավայրի բևեռացման հաշվառմամբ	138
Գ.Ա.Մուրադյան, Ա.Շ.Մուրադյան. Իդեալական գազի Բոզե–Էյնշտեյնյան կոնդենսացիայի կրիտիկական ջերմաստիճանի ադիաբատային փոփոխությունը օպտիկական ցանցերում	141
Մ.Զ.Հարությունյան. Լույսի կլանման առանձնահատկությունները լուկալ մեծ անիզոտրոպիայով օժտված քիրալ ֆոտոնային բյուրեղներում	151
Ա.Ա.Կոստանյան. Օպտիկական կլանումը պայմանավորված դոնոր-ակցեպտորային զույգերի միջև անցումներով պարաբոլային քվանտային փոսում	161
Մ.Ս.Մահակյան, Ս.Գ.Պետրոսյան. Ֆոկուսացված օպտիկական փնջով մակածված ֆոտոհոսանքը երկչափ <i>n-p-n</i> -կառուցվածքում	168
Ֆ.Վ.Գասպարյան. Ջերմային էֆեկտի ազդեցությունը արեգակնային էլեմենտի արդյունավետության վրա	174
Լ.Ս.Բեժանովա, Զ.Վ.Բաղդասարյան, Մ.Լ.Բաբուրյան. Որոշ սեզնետալեկտրական հեղուկ բյուրեղային համակարգերի մոլեկուլային կառուցվածքը և ֆիզիկական պարամետրերը	179
Ա.Հ.Մարտիրոսյան. Պոլիստրոլի հիմքով ստացված նանոկոմպոզիտների էլեկտրահաղորդականության կախվածությունը լցունված նյութի տեսակից և ջերմաստիճանից	187

CONTENTS

L.A.Gevorgyan, L.A.Hovsepyan. Radiation spectrum formation at the planar channeling of a positron bunch with allowance for the medium inhomogeneity.	131
L.A.Hovsepyan. Calculation of the photon spectrum radiated by a planarly channeled positron bunch with allowance for the medium polarization	138
G.A.Muradyan, A.Zh.Muradyan. Theory of critical temperature adiabatic change for the Bose–Einstein condensation of an ideal gas in optical lattices	141
M.Z.Harutyunyan. Features of light absorption in chiral photonic crystals with a large local anisotropy	151
A.A.Kostanyan. Optical absorption caused by the transitions between donor-acceptor pairs in a parabolic quantum well	161
M.S.Sahakyan, S.G.Petrosyan. Laser-beam-induced current in two-dimensional <i>n-p-n</i> -structures	168
F.V.Gasparyan. Influence of the thermal effect on the efficiency of a solar cell	174
L.S.Bezhanova, Z.V.Bagdasaryan, M.L.Baburyan. Molecular structure and physical parameters of some ferroelectric liquid crystal systems	179
A.A.Martirosyan. Dependence of the conductivity of polystirol-based nanocomposites on the type of fillers and temperature	187

СОДЕРЖАНИЕ

Л.А.Геворгян, Л.А.Овсепян. Формирование спектра излучения при плоскостном каналировании сгустка позитронов с учетом неоднородности среды	131
Л.А.Овсепян. Расчет спектра фотонов, излученных при плоскостном каналировании позитронного сгустка, с учетом поляризации среды.	138
Г.А.Мурадян, А.Ж.Мурадян. Теория адиабатического изменения критической температуры бозе-эйнштейновской конденсации идеального газа в оптической решетке.	141
М.З.Арутюнян. Особенности поглощения света в хиральных фотонных кристаллах с большой локальной анизотропией	151
А.А.Костанян. Оптическое поглощение, обусловленное переходами между донор-акцепторными парами в параболической квантовой яме	161
М.С.Саакян, С.Г.Петросян. Фототок в двумерной p - p -структуре, индуцированный фокусированным оптическим пучком	168
Ф.В.Гаспарян. Влияние теплового эффекта на эффективность солнечного элемента	174
Л.С.Бежанова, З.В.Багдасарян, М.Л.Бабурян. Молекулярная структура и физические параметры некоторых сегнетоэлектрических жидкокристаллических систем	179
А.А.Мартirosян. Зависимость электропроводности нанокомпозитов на основе полистирола от вида наполнителя и температуры.	187

Тираж 150. Сдано в набор 27.02.2007.

Подписано к печати 09.03.2007. Печ. л. 4.

Бумага офсетная. Цена договорная.

Типография НАН РА.

375019, Ереван, пр. Маршала Баграмяна, 24.