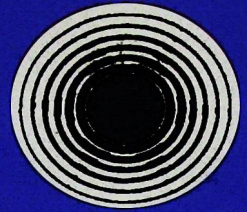


ФИЗИКА · ՖԻԶԻԿԱ · PHYSICS



ИЗВЕСТИЯ
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК АРМЕНИИ

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ
ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ

PROCEEDINGS
OF NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF ARMENIA

43, N4, 2008

ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ՀԱՆՐԱՊԵՏՈՒԹՅԱՆ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱ
НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК РЕСПУБЛИКИ АРМЕНИЯ

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ ИЗВЕСТИЯ
ՖԻԶԻԿԱ ФИЗИКА

ՀԱՏՈՐ ԾՈՄ

43

№ 4

ՀՀ ԳԱԱ "ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆ" ՀՐԱՏԱՐԱԿՈՒԹՅՈՒՆ

ИЗДАТЕЛЬСТВО "ТИТУПОН" НАН РА
ԵՐԵՎԱՆ ЕРЕВАН

2008

© 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

ԽՐԱԳՐԱԿԱՆ 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
Դ. Հ. Սարգսյան
Յու. Ս. Չիլինգարյան
Ա. Ա. Միրզախանյան, պատասխանատու քարտուղար

EDITORIAL BOARD

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

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

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

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

УДК 539.2

К ТЕОРИИ ОДНОМЕРНОГО СПИН-МАГНИТНОГО РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ

Р.М. МОВСЕСЯН, А.С. СААКЯН, М.А. ЧАЛАБЯН

Государственный инженерный университет Армении, Ереван

(Поступила в редакцию 16 января 2008 г.)

Рассмотрена гетероструктура, потенциальный рельеф которой состоит из двух магнитных квантовых барьеров с неколлинеарными намагниченностями, разделенных немагнитной квантовой ямой. Показано, что коэффициент прохождения неполяризованного по спину электрона оказывается модулированным, а параметром модуляции является угол между векторами намагниченности барьеров.

1. Использование туннельных структур является, по-видимому, наиболее эффективным способом получения спин-поляризованного тока. В работе [1] для этой цели использовался магнитный резонансно-туннельный диод с энергетическим профилем, содержащим два немагнитных барьера и одну магнитную квантовую яму. В работе [2] рассматривалось туннелирование неполяризованного по спину электрона через такую систему и было показано, что вблизи резонанса параллельно росту коэффициента прохождения должна наблюдаться практически стопроцентная спиновая поляризация электронов. В работе [3] рассматривалась туннельная структура с потенциальным рельефом, состоящим из двух магнитных барьеров с коллинеарными намагниченностями и одной немагнитной квантовой ямы, и было показано, что эта система вблизи резонанса прохождения также обладает очень высокой поляризующей способностью.

В настоящей работе рассмотрено туннелирование неполяризованного по спину электрона через систему, описанную выше, с той разницей, что намагниченности барьеров не коллинеарны. Показано, что коэффициент прохождения неполяризованных электронов оказывается промодулированным, а параметром модуляции является угол между векторами намагниченности барьеров. Отметим, что задача решена в пренебрежении орбитальными (диамагнитными) эффектами. Это можно сделать при выполнении следующего условия:

$$M \ll \frac{1}{L_z |e|} \sqrt{2m_2 U}, \quad (1)$$

где M – модуль намагниченности барьеров (они одинаковы для обоих барьеров), L_z – характерный поперечный размер магнитного слоя в гетероструктуре, m – эффективная масса электрона в области барьера, U – высота барьера. Магнитные слои обладают анизотропией “легкая плоскость”, и поэтому векторы намагниченности расположены в их плоскостях. Тогда

условие (1) означает, что циклотронная орбита электрона выходит за пределы толщины слоя d . При соответствующем выборе численных значений физических величин в (1) $M \ll (2-20) T\lambda$ – это очень хорошо выполняется не только для разбавленных магнитных полупроводников, но и для ферромагнитных металлов.

2. При выполнении условий этого приближения задача сводится к одномерной: рассматривается рассеяние неполяризованного электрона на системе из двух магнитных барьеров. Взаимодействие с барьером состоит из “электростатической” части, обусловленной разницей ширин запрещенных зон веществ в слоях, и спин-магнитной части. Тогда уравнение Шредингера, описывающее процесс рассеяния, имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left[\frac{1}{m(z)} \frac{d\hat{\psi}}{dz} \right] + U(\theta_1 + \theta_2) \hat{\psi} + (H_1 \theta_1 + H_2 \theta_2) \hat{\psi} = \hat{E} \hat{\psi}, \quad (2)$$

где $m(z)$ – переменная эффективная масса электрона, в дальнейшем $m(z) = m_1$ вне барьера и $m(z) = m_2$ внутри него; $\theta_1 = \theta(z) \theta(d-z)$, $\theta_2 = \theta(z-b) \theta(b+d-z)$, т.е. барьеры выбраны прямоугольные,

$$H_2 = -\mu \begin{pmatrix} M_{\ell z}, & M_{\ell \perp} e^{-i\varphi_\ell} \\ M_{\ell \perp} e^{i\varphi_\ell}, & -M_{\ell z} \end{pmatrix}, \quad \ell = 1, 2, \quad (3)$$

где индекс ℓ нумерует намагниченности барьеров, μ – магнетон Бора,

$$M_{\ell z} = M \cos \theta_\ell, \quad M_{\ell \perp} = M \sin \theta_\ell, \quad \tan \varphi_\ell = \frac{M_{y\ell}}{M_{x\ell}}. \quad (4)$$

В дальнейшем для упрощения задачи положим $\varphi_1 = \varphi_2$, т.е. намагниченности находятся в одной плоскости с осью z . Это позволит с помощью калибровочного преобразования волновой функции исключить зависимость спин-магнитного гамильтониана от φ .

3. Ось квантования направим вдоль намагниченности первого барьера ($\theta_1 = 0$, $\theta_2 = \theta$). H_1 и H_2 некоммутируют, поэтому их нельзя диагонализировать с помощью одного унитарного преобразования (при нашем выборе φ и θ – ортогонального преобразования), вообще говоря, избавляющего от перепутывания спинорных компонент волновой функции. Следовательно, трансфер-матрицу задачи рассеяния нельзя представить в блочно-диагональном виде [3], поэтому возникает необходимость последовательного построения трансфер-матрицы, что основано на сохранении плотности потока вероятностей и инвариантности уравнения Шредингера относительно инверсии времени [4,5]. В нашем случае, поскольку присутствует магнитное поле, то замена $t \rightarrow -t$ должна совершаться одновременно с $\psi^\alpha \rightarrow \psi_\alpha^*$, $\mathbf{M} \rightarrow -\mathbf{M}$, где верхние и нижние индексы обозначают контра- и ковариантные компоненты спинора [6].

Мы не будем излагать всю процедуру получения явного вида трансфер-матрицы и приведем лишь окончательные результаты.

Так, трансфер-матрица, описывающая переход через первый барьер, имеет вид

$$\begin{aligned}\sum(0) &= \begin{pmatrix} \alpha^* & \beta^* \\ -\beta & \alpha \end{pmatrix}, \\ \alpha &= \begin{pmatrix} 1/t_1 & 0 \\ 0 & 1/t_2 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} r_1/t_1 & 0 \\ 0 & r_2/t_2 \end{pmatrix},\end{aligned}\tag{5}$$

где t_ℓ , r_ℓ – парциальные амплитуды прохождения и отражения для уединенного барьера. Для прямоугольного барьера эти выражения получены в [3].

Трансфер-матрица, описывающая переход через второй барьер, имеет вид

$$\sum(\theta) = \begin{pmatrix} U\alpha^*U^+ & -U\beta^*U^+ \\ -U\beta U^+ & U\alpha U^+ \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -\sin \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}.\tag{6}$$

4. Знание трансфер-матрицы спин-магнитного рассеяния позволяет решить задачу рассеяния неполяризованного электрона на системе из двух магнитных барьеров. Так, достаточно просто получить следующее уравнение:

$$\begin{pmatrix} I \\ R \end{pmatrix} = \sum(0) V(b) \sum(\theta) V^{-1}(b) \begin{pmatrix} T \\ 0 \end{pmatrix},\tag{7}$$

где $I = \begin{pmatrix} e^{i\alpha} \\ 1 \end{pmatrix}$ соответствует амплитуде падающей, $R = \begin{pmatrix} R_1 \\ R_2 \end{pmatrix}$ – отраженной, и $T = \begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \end{pmatrix}$ – прошедшей волн,

$$V(b) = \begin{pmatrix} e^{ikb} & 0 \\ 0 & e^{-ikb} \end{pmatrix}, \quad e^{ikb} = \begin{pmatrix} e^{ikb} & 0 \\ 0 & e^{-ikb} \end{pmatrix},\tag{8}$$

b – расстояние между барьерами.

Уравнение (7) можно привести к следующему виду:

$$I = (\alpha U \alpha + e^{-2ikb} \beta^* U \beta) U^+ T.\tag{9}$$

Вычисление выражения в правой части (9) приводит к очень громоздким выражениям, поэтому здесь мы приведем метод приближенного вычисления T , основанный на теории возмущений. Учитывая коммутационные соотношения

$$[U, \alpha] = \eta_1 \sin \frac{\theta}{2} \sigma_x, \quad [U, \beta] = \eta_2 \sin \frac{\theta}{2} \sigma_x,\tag{10}$$

где σ_x – матрица Паули,

$$\eta_1 = \frac{1}{t_1} - \frac{1}{t_2}, \quad \eta_2 = \frac{r_1}{t_1} - \frac{r_2}{t_2},$$

уравнение (9) можно привести к виду

$$T = \left\{ e + \sin \frac{\theta}{2} T_0 \left(\eta_1 \alpha + e^{-2ikb} \eta_2 \beta^* \right) \sigma_x U^+ \right\}^{-1} T_0 I, \quad (11)$$

где $T_0 = \begin{pmatrix} T_{01} & 0 \\ 0 & T_{02} \end{pmatrix}$, $T_{0\ell}$ – амплитуды прохождения электроном двойного барьера в случае коллинеарных намагниченностей, e – единичная матрица.

Правую часть уравнения (11) можно представить в виде разложения в ряд:

$$T = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \sin^n \left(\frac{\theta}{2} \right) \left[T_0 \left(\eta_1 \alpha + e^{-2ikb} \eta_2 \beta^* \right) \sigma_x U^+ \right]^n T_0 I. \quad (12)$$

Ясно, что для обоснованности разложения (12) необходимо существование малого параметра; таковым может быть “знаменатель” геометрической прогрессии. Вдали от резонанса $T_{0\ell} \sim t_\ell^2$ и, кроме того, $\eta_{1,2} \sim 1/t_1 t_2$, так что выражение в квадратных скобках $\sim (1 - t_1/t_2)$ является малым в силу малости параметра $\mu M/U$. С другой стороны, применимость разложения (12) нарушается вблизи резонанса, когда $|T_{0\ell}|^2 = 1/2$, так что выражение (12) верно только вдали от резонанса прохождения.

Таким образом, вдали от резонанса прохождения с большой степенью точности можем оставить в (12) только первые два члена, и для коэффициента прохождения получается следующее выражение:

$$D = D_\uparrow + D_\downarrow - \left(D_\uparrow^2 + D_\downarrow^2 \right) \left| \frac{\eta_1}{t_1} + e^{-2ikb} \frac{\eta_2 t_2^*}{t_2} \right|^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}, \quad (13)$$

где $D_{\uparrow,\downarrow} = |T_{01,2}|^2/2$ – коэффициенты прохождения двойного барьера с коллинеарными намагниченностями, а коэффициент перед $\sin^2 \theta/2$ по порядку равен $(\mu M/U)^2$. Из (13) следует, что неколлинеарность намагниченностей уменьшает коэффициент прохождения.

5. Таким образом, неколлинеарность намагниченностей приводит к возникновению в коэффициенте прохождения модуляционного слагаемого, а малость его обусловлена нерезонансным характером прохождения; меняя взаимную ориентацию намагниченностей можно управлять коэффициентом прохождения. Подобный модуляционный эффект должен проявиться в ВАХ системы. Ясно, что степень спиновой поляризации прошедшей электронной волны будет достаточно низкой, а причиной является учет только нерезонансного прохождения.

Отметим, что в физике медленных нейтронов также актуально исследование рассеяния на слоях намагниченных веществ (полупрозрачные магнитные зеркала) и спиновой поляризации прошедших нейтронов [7,8]. Отсутствие орбитального квантования в рассмотренной выше задаче делает эти две проблемы эквивалентными.

ЛИТЕРАТУРА

1. A.Slobodskyy, G.Gould, T.Slobodskyy. Phys. Rev. Lett., **90**, 246601 (2003).
 2. **Р.М.Мовсесян, А.С.Саакян, М.А.Чалабян.** Изв. НАН Армении, Физика, **42**, 407 (2007).
 3. **Р.М.Мовсесян, А.С.Саакян.** Доклады НАН Армении, **107**, 66 (2007).
 4. **В.И.Арнольд.** Дополнительные главы теории обыкновенных дифференциальных уравнений. М., Наука, 1978.
 5. **P.Erdos, R.C.Herndon.** Adv. in Phys., **31**, 65 (1982).
 6. **Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц.** Квантовая механика. М., Наука, 1974.
 7. **Э.Ферми.** Лекции по атомной физике. М., РХД, 2001.
- А.И.Франк.** УФН, **161**, 11 (1991).

ԷԼԵԿՏՐՈՆՆԵՐԻ ՍՊԻՆ-ՄԱԳՆԵՏԱԿԱՆ ՄԻԱԶԱՍԻՆ

Ռ.Մ. ՄՈՎՍԵՍՅԱՆ, Ա.Ս. ՍԱՀԱԿՅԱՆ, Մ.Ա. ՉԱԼԱԲՅԱՆ

Դիտարկված է հետերոկառուցվածք, որի պոտենցիալային ուրվագիծը ներկայացնում է երկու ոչ համագիծ մագնիսական վեկտորներով մագնիսական քվանտային արգելքներ, որոնք բաժանված են ոչ մագնիսական քվանտային փոսով: Ցույց է տրված, որ ըստ սպինի չբևեռացված էլեկտրոնի անցման գործակիցը մոդուլացված է և որպես մոդուլացման պարամետր ծառայում է բևեռացման վեկտորների կազմած անկյունը:

ON THE THEORY OF ONE-DIMENTIONAL SPIN-MAGNETIC SCATTERING OF ELECTRONS

R.M. MOVSESSYAN, A.S. SAHAKYAN, M.A. CHALABYAN

A heterostructure with potential profile that consists of two magnetic barriers, with noncollinear magnetizations, separated by a nonmagnetic quantum well is considered. It is shown that the transmission coefficient of a non-spin-polarized electron is modulated and the angle between the magnetization vectors of barriers is the modulation parameter.

УДК 548.0

СРЕДЫ С НЕКЛАССИЧЕСКИМИ ФОРМАМИ ПОВЕРХНОСТЕЙ ВОЛНОВЫХ ВЕКТОРОВ КЛАССИЧЕСКОЙ ОПТИКИ

О.С. ЕРИЦЯН, А.А. ПАПОЯН, О.М. АРАКЕЛЯН

Ереванский государственный университет, Армения

(Поступила в редакцию 13 августа 2007 г.)

Рассмотрены формы поверхностей волновых векторов (ПВВ) известных в настоящее время сред и проведена систематизация последних по форме ПВВ. Указаны характерные особенности в оптических свойствах сред, обусловленные новыми формами ПВВ.

1. Введение

Поверхности волновых векторов, как известно, описывают зависимость волнового вектора распространяющейся в среде электромагнитной волны от направления распространения волны. ПВВ (замкнутые центросимметричные поверхности. Эти два свойства считаются столь естественными, что в литературе даже не упоминаются [1-5].

Между тем, начиная с 1950-х годов, в научной литературе появляются статьи об оптических свойствах различных сред, представляющих принципиальный интерес, поскольку они необычны для классической оптики. Эти среды, как показано ниже, описываются поверхностями волновых векторов с формой, также необычной для классической оптики. Новизна формы ПВВ заключается как в несоблюдении обычных свойств ПВВ (замкнутости и центросимметричности, так и в других особенностях, рассмотренных ниже. Понятно, что за особенностями ПВВ стоят особенности оптических свойств соответствующих сред. Перечислим вкратце ПВВ, необычные для классической оптики.

а) ПВВ, имеющие замкнутую и центросимметричную форму, но не расщепляющиеся на две подповерхности (соответствующие двум поляризациям), несмотря на наличие анизотропии.

б) Центросимметричные замкнутые ПВВ со смещенным физическим центром (откуда откладываются волновые векторы). Отметим, что обычно в оптике физический центр в то же время есть и геометрический центр.

в) Нецентросимметричные замкнутые ПВВ.

г) Инверсные замкнутые центросимметричные ПВВ (у которых внешняя и внутренняя области переставлены).

д) Открытые центросимметричные ПВВ.

е) Открытые нецентросимметричные ПВВ.

Прежде чем перейти к рассмотрению сред с ПВВ, перечисленными выше, отметим,

что они расположены ниже не по хронологическому порядку рассмотрения соответствующих сред, а по степени отличия формы ПВВ от обычной замкнутой центросимметричной формы. Авторы работ, относящихся к средам, отмеченным в пункте б (магнитоэлектрические среды) [6(10)], привлекли к рассмотрению также вопрос о форме ПВВ.

2. Замкнутые центросимметричные ПВВ с одинаковым радиусом-вектором для любой поляризации, несмотря на наличие анизотропии

Таковыми ПВВ описываются среды, названные в [3] однопреломляющими (см. также [6]). Однако в [3] не рассмотрены ПВВ. Однопреломление заключается в том, что волна не расщепляется на две волны с разными поляризациями, т.е. модуль волнового вектора, будучи зависящим от направления распространения, не зависит от поляризации. Такая независимость имеет место при соблюдении следующего соотношения между тензорами $\hat{\epsilon}$ и $\hat{\mu}$ диэлектрической и магнитной проницаемостей:

$$\tilde{\mu}^{-1} = p\hat{\epsilon}^{-1}, \quad (1)$$

где тильдой обозначено транспонирование, p - скаляр. В простейшем случае тензоров $\hat{\epsilon}$ и $\hat{\mu}$, приводимых к диагональному виду в одной и той же системе координат, условие (1) принимает вид

$$\frac{\epsilon_{xx}}{\mu_{xx}} = \frac{\epsilon_{yy}}{\mu_{yy}} = \frac{\epsilon_{zz}}{\mu_{zz}}. \quad (2)$$

Дисперсионное уравнение имеет вид

$$k_z^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon_3} + \frac{\mu_1}{\mu_3} \right) k_x^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\epsilon_2}{\epsilon_3} + \frac{\mu_2}{\mu_3} \right) k_y^2 - \frac{1}{2} \frac{\omega^2}{c^2} (\epsilon_1\mu_2 + \epsilon_2\mu_1) = 0. \quad (3)$$

Уравнение (3) (не четвертой степени относительно компонент вектора $\mathbf{k}$, а второй степени и описывает эллипсоид.

Независимость $\mathbf{k}$ от поляризации имеет простую интерпретацию [3]. Пусть волна распространяется вдоль оси z . Тогда для k^2 будем иметь

$$k_1^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_1\mu_2, \quad k_2^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_2\mu_1. \quad (4)$$

В общем случае $\epsilon_1\mu_2 \neq \epsilon_2\mu_1$, и имеем $k_1 \neq k_2$: в одном направлении распространяются две волны с разными поляризациями и ПВВ оказывается расщепленной на две. В случае одноосной среды имеем сферу и эллипсоид, показывающие зависимость модуля $\mathbf{k}$ от направления распространения. Если же имеет место соотношение (1), то $\epsilon_1\mu_2 = \epsilon_2\mu_1$ и, следовательно, $k_1 = k_2$: в одном направлении распространяется одна волна с волновым вектором, не зависящим от поляризации. В то же время k зависит от направления распространения. Это явление показывает, что двупреломление, т.е. зависимость k от поляризации, обусловлено не анизотропией ϵ_{ij} (т.е. $(\epsilon_{\alpha\alpha} - \epsilon_{\beta\beta})/(\epsilon_{\alpha\alpha} + \epsilon_{\beta\beta})$) или μ_{ij} (т.е. $(\mu_{\alpha\alpha} - \mu_{\beta\beta})/(\mu_{\alpha\alpha} + \mu_{\beta\beta})$), а разной анизотропией тензоров ϵ_{ij} и μ_{ij} [3]. Действительно, нетрудно убедиться, что при соблю-

дении (1) или, проще говоря, (2) имеет место равенство анизотропий ϵ_{ij} и μ_{ij} :

$$\frac{\epsilon_{\alpha\alpha} - \epsilon_{\beta\beta}}{\epsilon_{\alpha\alpha} + \epsilon_{\beta\beta}} = \frac{\mu_{\alpha\alpha} - \mu_{\beta\beta}}{\mu_{\alpha\alpha} + \mu_{\beta\beta}}. \quad (5)$$

На рис.1а представлена ПВВ для одноосного кристалла с анизотропным ϵ_{ij} и изотропным μ_{ij} , на рис.1б - ПВВ с одновременно анизотропными ϵ_{ij} и μ_{ij} , удовлетворяющими условию однопреломления (1).

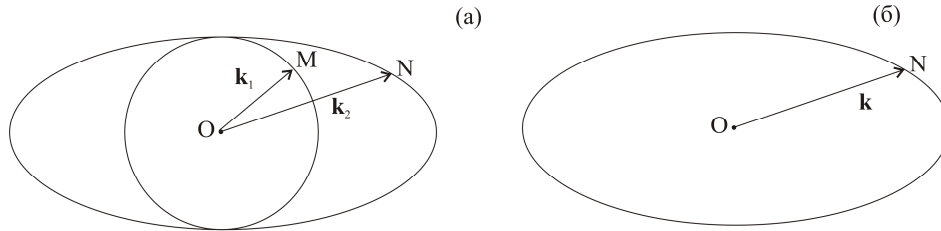


Рис.1. Форма ПВВ для одноосного кристалла с анизотропным ϵ_{ij} и изотропным μ_{ij} (а), и для одноосного кристалла с одновременно анизотропными ϵ_{ij} и μ_{ij} , удовлетворяющими условию однопреломления (б).

3. Замкнутые центросимметричные ПВВ со смещенным физическим центром

Таковыми ПВВ обладают магнитоэлектрические среды [7-11]. Материальные уравнения для таких сред имеют вид

$$\mathbf{D} = \hat{\epsilon}\mathbf{E} + \hat{\nu}\mathbf{H}, \quad \mathbf{B} = \hat{\mu}\mathbf{H} + \hat{\beta}\mathbf{E}. \quad (6)$$

Для ряда одноосных кристаллов, благодаря свойствам тензоров $\hat{\nu}$ и $\hat{\beta}$, уравнения (6) приводятся к виду

$$\mathbf{D} = \hat{\epsilon}\mathbf{E} + [\hat{\rho}\mathbf{H}], \quad \mathbf{B} = \hat{\mu}\mathbf{H} - [\hat{\rho}\mathbf{E}]. \quad (7)$$

Уравнения Максвелла

$$[\mathbf{kH}] = -\frac{\omega}{c}\mathbf{D}, \quad [\mathbf{kE}] = \frac{\omega}{c}\mathbf{B} \quad (8)$$

для такой среды совпадают с уравнениями для среды

$$\mathbf{D} = \hat{\epsilon}\mathbf{E}, \quad \mathbf{B} = \hat{\mu}\mathbf{H}, \quad (9)$$

если заменить $\mathbf{k}$ на $\mathbf{k} + \mathbf{p}$.

На рис.2а изображена форма ПВВ для одноосных кристаллов без магнитоэлектрического эффекта. Присутствие магнитоэлектрического эффекта оставляет форму ПВВ неизменной, но волновой вектор $\mathbf{k}$ откладывается не от геометрического центра $O_{\text{геом.}}$, которой обладает ПВВ геометрически, а от смещенной от нее на $\mathbf{p}$ точки $O_{\text{физ}}$ - физического центра: рис.2б соответствует такой среде.

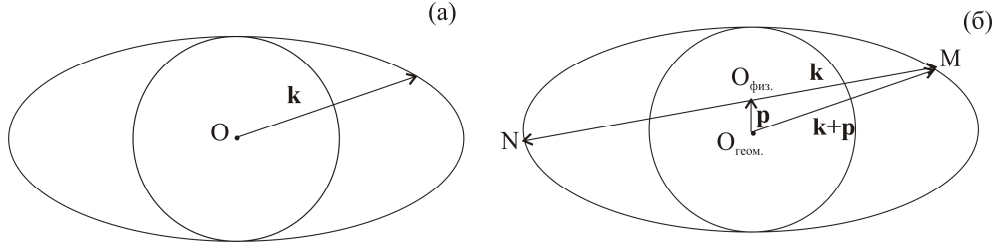


Рис.2. Форма ПВВ для одноосных кристаллов без магнитоэлектрического эффекта (а) и при наличии магнитоэлектрического эффекта (б).

Такое смещение приводит к необратимости волн: волновые векторы, соответствующие двум взаимно противоположным направлениям, имеют неодинаковые модули. Это имеет место для обеих волн, которым соответствуют сфера и эллипсоид (обыкновенная и необыкновенная волна). Необратимость имеет место не только в отношении волнового вектора, но и в отношении вектора групповой скорости.

4. Замкнутые нецентросимметричные ПВВ

Таковыми ПВВ описываются естественно гиротропные среды при наличии магнитооптической активности. Нецентросимметричностью ПВВ обусловлены необратимость волн и асимметрия ряда оптических свойств [12-15].

В число естественно гиротропных сред входят среды с право-левой асимметрией молекулярной структуры (оптически активные немагнитные и магнитные среды), среды с надмолекулярной спиральной структурой (какими являются холестерические жидкие кристаллы), спиральные магнитные структуры. Будем ограничиваться случаем естественно гиротропной среды при наличии внешнего магнитного поля (рассмотрение более общих случаев можно найти в [13-15]). Этот случай, будучи простым, одновременно отражает физическую картину необратимости волн.

Материальные уравнения для такой среды имеют вид

$$\mathbf{D} = \hat{\varepsilon}\mathbf{E} + i[\mathbf{g}(\mathbf{k})\mathbf{E}] + i[\mathbf{g}(\mathbf{H}^{ext})\mathbf{E}], \quad \mathbf{B} = \mu\mathbf{H}. \quad (10)$$

Второй член первого уравнения ответствен за естественную оптическую активность, третий - за магнитооптическую активность. Компоненты вектора естественной активности $\mathbf{g}(\mathbf{k})$ линейно зависят от компонент волнового вектора, а компоненты вектора магнитооптической активности $\mathbf{g}(\mathbf{H}^{ext})$ - от компонент внешнего магнитного поля (также линейно). Уравнения (10) могут быть записаны в виде

$$\mathbf{D} = \hat{\varepsilon}\mathbf{E} + i[(\mathbf{g}(\mathbf{k}) + \mathbf{g}(\mathbf{H}^{ext}))\mathbf{E}], \quad \mathbf{B} = \mu\mathbf{H}. \quad (11)$$

При замене $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ сумма $G_1 = \mathbf{g}(\mathbf{k}) + \mathbf{g}(\mathbf{H}^{ext})$ переходит в разность $G_2 = -\mathbf{g}(\mathbf{k}) + \mathbf{g}(\mathbf{H}^{ext})$. Поэтому замена $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ меняет дисперсионное уравнение, и, следовательно, если $\mathbf{k}$ - его решение, то $-\mathbf{k}$ не является решением. Это означает, что имеет место необратимость волн.

Будем конкретизировать дальнейшее рассмотрение на простейшем случае изотропной

среды при наличии магнитного поля -общее рассмотрение можно найти в [13-15]).

Материальные уравнения для такой среды могут быть записаны в виде [15]

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E} + i\gamma[\mathbf{kE}] + i[\mathbf{gE}], \quad \mathbf{B} = \mu \mathbf{H}. \quad (12)$$

Для $\mathbf{k}$ получаем

$$k^{\pm 2} = \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon \mu \left[1 \pm \left(\frac{\gamma_0}{\epsilon} + \frac{g}{\epsilon} \cos \alpha^{\pm} \right) \right], \quad \gamma_0 = \frac{\omega}{c} \gamma \sqrt{\epsilon \mu}, \quad (13)$$

где $\alpha^{\pm}$ - углы между направлениями распространения волн с волновыми векторами $\mathbf{k}^{+}$ и $\mathbf{k}^{-}$ и магнитным полем.

При замене $\alpha^{\pm} \rightarrow \alpha^{\pm} + \pi$ (и $\alpha^{\pm} \rightarrow \alpha^{\pm} - \pi$) суммы $\gamma_0 \epsilon^{-1} + g \epsilon^{-1} \cos \alpha^{\pm}$ переходят в разности $\gamma_0 \epsilon^{-1} - g \epsilon^{-1} \cos \alpha^{\pm}$. Поэтому модули $k^{\pm}$ меняются при замене направления их распространения на обратное, в чем и выражается необратимость.

Необратимость может быть интерпретирована следующим образом. Пусть волны распространяются в направлении магнитного поля и естественное и магнитооптическое вращения плоскости поляризации, обусловленные естественной гиротропией и магнитооптической активностью, имеют одинаковое направление (противоположные направления), т.е. естественное и магнитооптическое вращения складываются (вычитываются). Изменим теперь направление распространения на обратное. Тогда естественное вращение изменит свое направление относительно направления магнитного поля, а магнитооптическое не изменит (это известное свойство двух типов вращения следует также из (12): естественное вращение определяется направлением волнового вектора, а магнитооптическое (направлением вектора магнитооптической активности $\mathbf{g}$). Поэтому естественное и магнитооптическое вращения теперь будут вычитываться (складываться), т.е. прямое и обратное направления распространения неэквивалентны.

Это отражается на форме ПВВ (рис.3), которая в простейшем случае изотропной среды, обладающей одновременно естественной и магнитооптической активностями, представляет две сферы с разными радиусами, причем центры сфер O_1 и O_2 смещены от физического центра O в противоположные стороны, в направлении внешнего магнитного поля. Такой вид ПВВ объясняется следующим образом [13]. В отсутствие магнитного поля и естественной гиротропии ПВВ представляет собой сферу (поверхность А на рис.4). Естественная гиротропия приводит к тому, что вместо одной сферы имеем две концентрические сферы с разными радиусами, соответствующими волнам с правой и левой круговой поляризациями (В, рис.4). Если на изотропную негиротропную среду наложить магнитное поле, то из-за появления магнитооптической активности сфера А распадается на две, с теми же радиусами, что и А, но смещенные на одну и ту же величину в противоположные стороны вдоль внешнего магнитного поля [1] (поверхность С; звездочками обозначены центры сфер). Если же имеются одновременно как естественная гиротропия, так и магнитооптическая активность, то получаем смещенные в противоположные стороны сферы с разными радиусами (поверхность D, рис.4). Теперь, в отличие от поверхностей А, В, С, поверхность D не обладает центром симметрии.

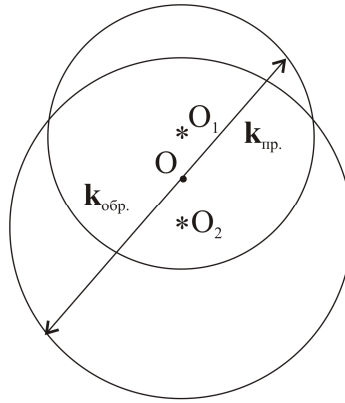


Рис.3. Форма ПВВ для изотропной среды, обладающей одновременно естественной и магнитооптической активностями.

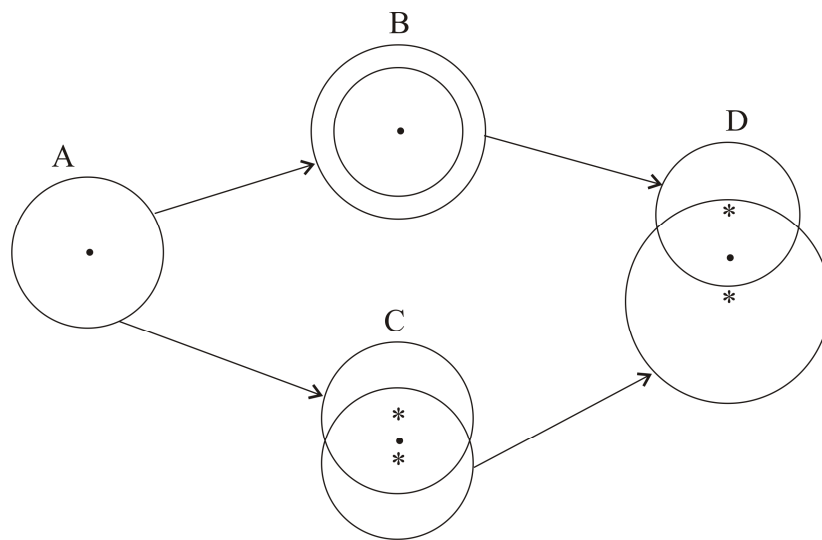


Рис.4. Формы ПВВ для изотропной среды в разных ситуациях.

5. Замкнутые центросимметричные инверсные ПВВ

В работе [16] рассмотрены изотропные среды с одновременно отрицательными диэлектрической и магнитной проницаемостями ϵ и μ . Согласно уравнениям Максвелла

$$[\mathbf{kH}] = -\frac{\omega}{c}\epsilon\mathbf{E}, \quad [\mathbf{kE}] = -\frac{\omega}{c}\mu\mathbf{H}, \quad (14)$$

векторы $\mathbf{k}$, $\mathbf{E}$, $\mathbf{H}$ при $\epsilon < 0$, $\mu < 0$ составляют левую тройку, поэтому вектор Пойнтинга $\mathbf{S} = c[\mathbf{EH}]/4\pi$, составляющий правую тройку с $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$, направлен противоположно волновому вектору $\mathbf{k}$. Можно непосредственно убедиться также, что вектор групповой скорости $\mathbf{u}$, определяемый как

$$\mathbf{u} = \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{k}}, \quad (15)$$

направлен противоположно вектору $\mathbf{k}$. Если придерживаться классического результата, согласно которому групповая скорость направлена по внешней нормали к ПВВ, то при $\epsilon < 0$, $\mu < 0$ направление внешней нормали будет противоположно направлению при $\epsilon > 0$, $\mu > 0$ (рис.5а,б). Область, внутренняя при $\epsilon > 0$, $\mu > 0$, является внешней при $\epsilon < 0$, $\mu < 0$. В этом смысле ПВВ при $\epsilon < 0$, $\mu < 0$ можно назвать инверсной.

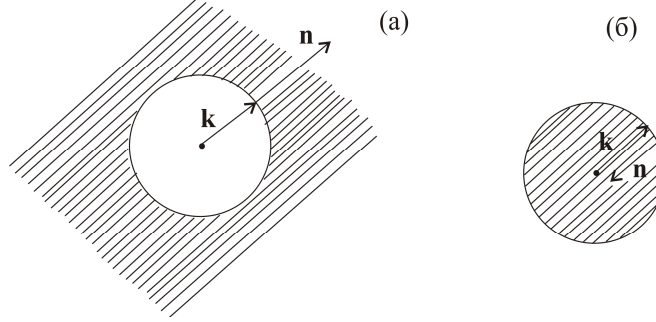


Рис.5. Направление внешней нормали ($\mathbf{n} = \partial \omega / \partial \mathbf{k}$) в случае, когда $\epsilon > 0$, $\mu > 0$ (а), и в случае, когда $\epsilon < 0$, $\mu < 0$ (б).

В среде с $\epsilon < 0$, $\mu < 0$ вместо светового давления, согласно [16], имеет место притяжение отражающей среды к источнику света. Имеет место также фокусировка расходящегося пучка при его отражении на плоской границе среды. Отметим, что в [16] ПВВ не рассмотрена.

6. Открытые центросимметричные ПВВ

В работе [17] рассмотрены оптические свойства немагнитных кристаллов с разными знаками компонент тензора диэлектрической проницаемости. Показано, что наличие отрицательной компоненты тензора вместе с положительной приводит к тому, что поверхность волновых векторов оказывается открытой. Ниже рассмотрим простой случай одноосной среды.

Дисперсионное уравнение имеет вид

$$\left(k_0^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_{\perp} \right) \left(\frac{k_{ex}^2 + k_{ey}^2}{\epsilon_{\parallel}} + \frac{k_{ez}^2}{\epsilon_{\perp}} - \frac{\omega^2}{c^2} \right) = 0, \quad (16)$$

где k_0 - модуль волнового вектора обыкновенной волны, k_{ex}, k_{ey}, k_{ez} - компоненты волнового вектора необыкновенной волны, ось z направлена вдоль оптической оси кристалла. На рис.6 представлены ПВВ в разных случаях выбора знаков $\epsilon_{\perp}$ и $\epsilon_{\parallel}$.

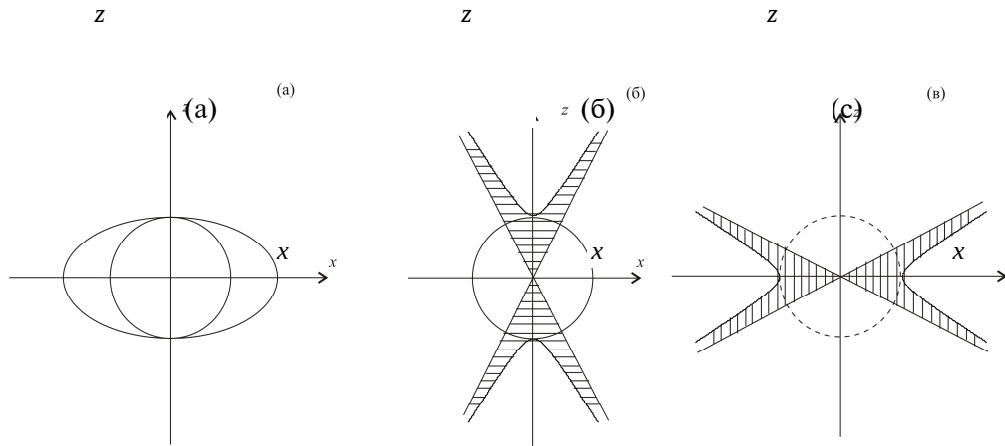


Рис.6. Форма ПВВ для одноосного кристалла в случаях, когда $\epsilon_{\perp} > 0$ и $\epsilon_{\parallel} > 0$ (а), когда $\epsilon_{\perp} > 0$ и $\epsilon_{\parallel} < 0$ (б), и когда $\epsilon_{\perp} < 0$ и $\epsilon_{\parallel} > 0$ (в).

Рис.6а соответствует кристаллу с $\epsilon_{\perp} > 0$ и $\epsilon_{\parallel} > 0$: ПВВ - сфера и эллипсоид вращения. Рис.6б соответствует случаю $\epsilon_{\perp} > 0$, $\epsilon_{\parallel} < 0$: ПВВ - сфера и гиперboloид вращения; в кристалле могут распространяться как обыкновенная волна (на ПВВ ей соответствует сфера), так и необыкновенная (ей соответствует гиперboloид вращения; ось гиперboloида направлена вдоль оптической оси кристалла). Рис.6в соответствует случаю $\epsilon_{\perp} < 0$, $\epsilon_{\parallel} > 0$. Обыкновенной волны нет (в соответствии с чем сфера показана пунктиром). В обоих случаях ($\epsilon_{\perp} > 0$, $\epsilon_{\parallel} < 0$ и $\epsilon_{\perp} < 0$, $\epsilon_{\parallel} > 0$) необыкновенная волна может распространяться. Но, в отличие от случая $\epsilon_{\perp} > 0$, $\epsilon_{\parallel} > 0$, направления распространения ограничены асимптотами гиперboloидов вращения.

Внешней областью открытой ПВВ, соответствующей необыкновенной волне, будем считать область, в которую направлен вектор Пойнтинга. Эта область может быть определена непосредственным расчетом [15]. На рис.6б, в внутренние области заштрихованы.

Отметим также, что эллипсоид Френеля и характеристические поверхности тензоров ϵ_{ij} и ϵ_{ij}^{-1} также превращаются в гиперboloиды [18].

В средах с открытой ПВВ имеет место также фокусировка при преломлении расходящегося пучка на плоской границе [19]. Отметим также, что полное отражение от такой среды может иметь место при нормальном падении, а преломленная волна появляется при увеличении угла падения.

Среды с разными знаками компонент ϵ_{ij} исследованы также в [20]. При этом автор не привлекает в рассмотрение форму ПВВ.

7. Открытые нецентросимметричные ПВВ

При соблюдении разных знаков у компонент ϵ_{ij} ПВВ становится открытой. Выше было показано (пункт 4), что нецентросимметричность возникает в при наличии естественной гиротропии и магнитооптической активности. Поэтому среды с разными знаками компонент ϵ_{ij} , обладающие естественной гиротропией, при наличии внешнего магнитного поля должны описываться открытыми нецентросимметричными ПВВ.

Выше мы ограничились указанием лишь той или иной особенности сред, обусловленной формой ПВВ, не останавливаясь на всестороннем изучении оптических свойств рассмотренных сред, являющемся самостоятельной задачей.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц.** Электродинамика сплошных сред. М., Наука, 1982.
2. **М.Борн, Э.Вольф.** Основы оптики. М., Наука, 1970
3. **Ф.И.Федоров.** Оптика анизотропных сред. Минск, изд. АН БССР, 1958.
4. **Ф.И.Федоров.** Теория гиротропии. Минск, Наука и техника, 1976.
5. **А. Ярив, П.Юх.** Оптические волны в кристаллах. М., Мир, 1987.
6. **Ф.И.Федоров.** Оптика и спектр., **2**, 514 (1957).
7. **В.Н.Любимов.** ДАН СССР, **181**, 858 (1968).
8. **В.Н.Любимов.** Кристаллография, **13**, 1008 (1968).
9. **В.Н.Любимов.** ФТТ, **10**, 3502 (1968).
10. **В.Н.Любимов.** Кристаллография, **14**, 213 (1969).
11. **В.Н.Любимов.** Кристаллография, **12**, 708 (1967).
12. **О.С.Ерицян.** Изв. АН Арм. ССР, Физика, **3**, 217 (1968).
13. **О.С.Ерицян.** УФН, **138**, 645 (1982).
14. **О.С.Ерицян.** ФТТ, **22**, 3684 (1980).
15. **О.С.Ерицян.** Оптика гиротропных сред и холестерических жидких кристаллов. Ереван, Айастан, 1988.
16. **В.Г.Веселаго.** УФН, **92**, 517 (1967).
17. **О.С.Ерицян.** Кристаллография, **33**, 461 (1978).
18. **О.С.Ерицян, О.М.Аракелян.** Изв. НАН Армении, Физика, **38**, 312 (2003).
19. **О.С.Ерицян, А.А.Папоян, О.М.Аракелян, А.А.Лалаян, Р.Б.Костанян.** Изв. НАН Армении, Физика, **41**, 178 (2006).
20. **М.И.Рязанов.** ЖЭТФ, **103**, 1840 (1993).

MEDIA WITH NON-CLASSICAL FORMS OF THE SURFACES OF WAVE VECTORS OF CLASSICAL OPTICS

H.S. ERYTSYAN, A.A. PAPOYAN, H.M. ARAKELYAN

The forms of surfaces of wave vectors (SWV) of the known media are considered and the systematization of them by the form of SWV is made. The characteristic features of optical properties of the media stipulated by the new forms of SWV are indicated.

УДК 532.783

НЕЛОКАЛЬНАЯ 3D ДИФФУЗИОННАЯ МОДЕЛЬ ЗАПИСИ ТОЛСТЫХ ДИФРАКЦИОННЫХ РЕШЕТОК В ПОЛИМЕРНО-ДИСПЕРГИРОВАННЫХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛАХ

А.Л. АСЛАНЯН, А.В. ГАЛСТЯН, Р.С. АКОПЯН

Ереванский государственный университет, Армения

(Поступила в редакцию 26 марта 2008 г.)

Рассмотрена динамика процесса записи голографических дифракционных решеток в полимерно-диспергированных жидких кристаллах с учетом поглощения. Учтены процессы диффузии молекул не только мономера, но и полимера, а также влияние неоднородности освещения внутри образца за счет поглощения света. Рассмотрена также роль нелокальности отклика процесса полимеризации.

1. Введение

Фотополимерные материалы с примесью молекул жидкого кристалла удобны для оптической записи высокоэффективных дифракционных решеток с управляемыми параметрами и имеют постоянно увеличивающееся применение [1-4]. Одним из основных требований для этого применения является то, что толщина материала должна быть 500 мкм или более [5].

Было предложено много теоретических двумерных моделей для анализа записи дифракционных решеток в тонких слоях, где не учитывалось поглощение света [6-9]. Однако присутствие молекул красителя в растворе приводит к поглощению и интенсивность света вдоль направления распространения уменьшается. Для достаточно толстых решеток такое поглощение существенно и пренебрегать им при теоретическом анализе нельзя. В результате имеющиеся двумерные модели становятся непригодными для толстых голографических решеток.

В работе [10] была предложена трехмерная модель для описания динамики записи голографических решеток в толстых фотополимерных слоях. Для количественного описания поведения смеси в слое образца применялся метод разделения на тонкие подслои. Такое разделение позволяет применять двумерную модель для каждого подслоя в отдельности. Однако в описанной модели [10] не учитывалась диффузия молекул полимера и нелокальность процесса полимеризации. В работе [9] нами было рассмотрено влияние диффузии молекул полимера на качество записываемой дифракционной решетки и обсуждены режимы, при которых она существенна. Например, в ряде случаев, в зависимости от типа полимера, полимеризованные молекулы успевают диффундировать в темные области интерференцион-

ной картины и ухудшают модуляцию концентрации. В результате профиль показателя преломления внутри образца расплывается и качество записанной дифракционной решетки ухудшается. Существенную роль играет также нелокальность процесса полимеризации.

Очевидно, что учет дополнительных процессов, имеющих место в процессе фотополимеризации, позволяет улучшить физическую точность управляемой нелокальной диффузионной модели и тем самым способствовать полному пониманию динамики процесса записи дифракционных решеток.

Целью настоящей работы является развитие диффузионной модели процесса записи толстых дифракционных решеток в полимерно-диспергированных жидких кристаллах (ПДЖК) с учетом нелокальности процесса полимеризации и диффузии полимеризованных молекул.

2. Теория

Рассмотрим процесс записи дифракционной решетки в трехкомпонентной смеси (мономер–краситель–жидкий кристалл). Выберем систему координат следующим образом: пусть ось z направлена вдоль толщины слоя, а оси x и y лежат в поперечной плоскости (рис.1).

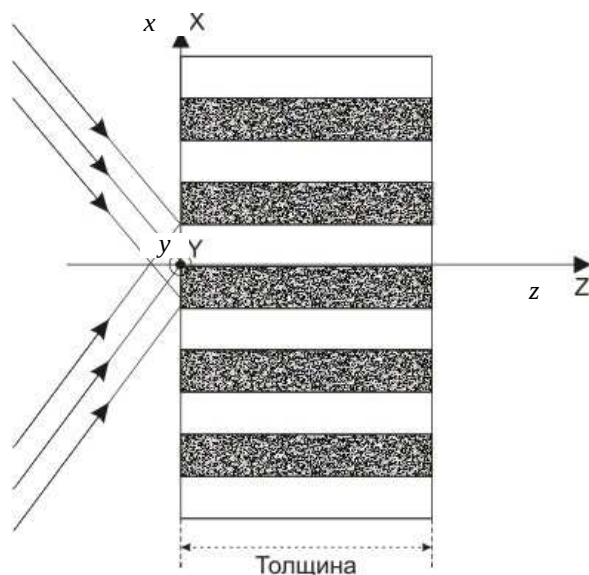


Рис.1. Геометрия задачи.

При записи стандартных голограмм кювета освещается интерференционной картиной двух плоских волн, при этом в результате интерференции распределение света в образце является периодическим. С учетом поглощения света распределение интенсивности вдоль направления z имеет следующий вид:

$$I(x, z, t) = I_0 [1 + V \cos(K_g x)] e^{-\alpha(t)z}, \quad (1)$$

где ось x направлена вдоль линии пересечения плоскости падения пучков и ПДЖК пленки, I_0 – средняя интенсивность света (см. рис.1), V – глубина модуляции, $K_g = 2\pi/\Lambda$ – волновое число дифракционной решетки, Λ – период модуляции, $\alpha(t)$ – зависящий от времени коэффициент поглощения, начальное значение которого известно, если известны физическая толщина и пропускание образца.

Вследствие просветления красителя в результате участия молекул в цепной реакции, коэффициент поглощения уменьшается пропорционально длительности освещения. Временная зависимость коэффициента поглощения описывается следующим уравнением [10]:

$$d\alpha(t)/dt = -\alpha(t)K_\alpha I_0. \quad (2a)$$

Здесь K_α – коэффициент, описывающий скорость расхода красителя. Решение (2a) имеет вид

$$\alpha(t) = \alpha_0 e^{-K_\alpha I_0 t}, \quad (2б)$$

где α_0 – начальное значение коэффициента поглощения. Формула (2б) указывает, что коэффициент поглощения уменьшается пропорционально длительности освещения по экспоненциальному закону.

При формировании дифракционной решетки существенными являются следующие процессы.

- а) *Полимеризация и диффузия молекул мономера.* Под действием света молекулы мономера полимеризуются. В результате в более освещенных местах интерференционной картины концентрация мономера уменьшается. Из менее освещенных областей молекулы мономера диффундируют в более освещенные области. Благодаря таким диффузионным потокам и создается пространственная модуляция плотности конечного полимера, а значит, и коэффициента преломления.
- б) *Нелокальность процесса полимеризации.* В диффузионной модели реакция фотополимера на падающий свет обычно считается локальной, то есть процесс полимеризации в данной точке не зависит от значения интенсивности света в соседних точках и в предыдущие моменты времени. Однако, в ряде случаев, в зависимости от механизмов записи и характерных времен, становится необходимым учет нелокальности отклика [8]. Для общности в настоящей работе нами учитывается также пространственная нелокальность отклика.
- в) *Диффузия молекул полимера.* Немаловажно, что идет также обратный процесс. Полимеризованные молекулы в свою очередь диффундируют из освещенных областей в менее освещенные. Необходимость учета такого обратного процесса в тонких слоях впервые обсуждалась в [9].

Запишем диффузионные уравнения, в которые включены слагаемые, учитывающие указанные процессы. Считая освещение вдоль оси u однородным, представим уравнения диффузии молекул мономера и полимера в следующем виде:

$$\frac{\partial U(x, z, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_U \frac{\partial U(x, z, t)}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_U \frac{\partial U(x, z, t)}{\partial z} \right) - \frac{\partial N(x, z, t)}{\partial t}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial N(x, z, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_N \frac{\partial N(x, z, t)}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_N \frac{\partial N(x, z, t)}{\partial z} \right) + \int_{-\infty}^{+\infty} R(x, x') k_R(t) I(x', z, t) U(x', z, t) dx'. \quad (4)$$

Здесь $U(x, z, t)$ – концентрация молекул мономера, $N(x, z, t)$ – концентрация молекул полимера. Временное уменьшение коэффициента полимеризации $k_R(t)$ описывается уравнением

$$dk_R(t)/dt = -k_R(t)\phi I_0 \quad (5)$$

с начальным условием $k_R(t=0) = k_R$, где ϕ – скорость убывания коэффициента полимеризации. Первые два члена в правых частях уравнений (3) и (4) описывают диффузионные процессы мономера и полимера, соответственно, а последний член в (4) – процесс полимеризации с учетом пространственной нелокальности. Для радиуса нелокальности в последующих расчетах нами использовано гауссовское распределение

$$R(x - x') = \exp \left(-\frac{(x - x')^2}{2\sigma} \right) / \sqrt{2\pi\sigma}, \quad (6)$$

где $\sqrt{\sigma}$ описывает длину нелокальности отклика, то есть пространственный масштаб той области, в которой существенно воздействие соседних точек. Молекулы ЖК не влияют на протекание процесса полимеризации и поэтому не включены в диффузионные уравнения, а их концентрацию можно найти из условия нормировки $U + N + L = 1$. Для упрощения системы уравнений (3) и (4) сделаем следующее замечание: если толщина слоя порядка 1 мм, а период решетки меньше 1 мкм, то, как показывают простые оценки,

$$\partial U(x, z, t) / \partial x \gg \partial U(x, z, t) / \partial z, \quad \partial N(x, z, t) / \partial x \gg \partial N(x, z, t) / \partial z.$$

Это означает, что диффузией молекул мономера и полимера вдоль z можно пренебречь. Такое приближение позволяет трехмерные диффузионные уравнения свести к двумерным:

$$\frac{\partial U(x, z, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_U \frac{\partial U(x, z, t)}{\partial x} \right) - \frac{\partial N(x, z, t)}{\partial t}, \quad (7)$$

$$\frac{\partial N(x, z, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_N \frac{\partial N(x, z, t)}{\partial x} \right) + \int_{-\infty}^{+\infty} R(x, x') k_R(t) I(x', z, t) U(x', z, t) dx'. \quad (8)$$

Учитывая пространственную периодичность освещающего излучения, концентрации мономера $U(x, z, t)$ и полимера $N(x, z, t)$ можно представить в виде ряда Фурье

$$U(x, z, t) = \sum_{i=0}^{\infty} U_i(z, t) \cos(ikx), \quad N(x, z, t) = \sum_{i=0}^{\infty} N_i(z, t) \cos(ikx)$$

и подставить в уравнения (7) и (8). Оценки показывают, что Фурье-гармоники выше второго порядка приводят к малым поправкам, и следовательно, в Фурье-разложении $U(x, z, t)$ и $N(x, z, t)$ можно оставить первые три члена. Окончательно получим шесть связанных дифференциальных уравнений для $U_0(z, t)$, $U_1(z, t)$, $U_2(z, t)$ и $N_0(z, t)$, $N_1(z, t)$, $N_2(z, t)$. Эта система уравнений позволяет проанализировать основные особенности динамики процесса записи дифракционной решетки.

3. Результаты

Полученная в работе система уравнений нами решена численным методом с помощью программы “Mathematica 6”. В качестве примера на рис.2 показан профиль записанной дифракционной решетки в случае локальной модели без учета и с учетом диффузии молекул полимера при одном и том же значении коэффициента поглощения, а на рис.3 – для случая нелокальной модели. Результаты получены для следующих численных значений использованных параметров: $\nu = 0.5$; $D_m = 0.02$; $\alpha_m = 0.2$; $K = 0.016 \text{ см}^2/\text{мДж}$; $k = 6.28$; $I_0 = 5 \text{ мВт/см}^2$; $\varphi = 0.006$; $\alpha_0 = 0.006$; $K_\alpha = 0.005$. Сравнение этих рисунков позволяет отметить следующие характерные особенности: 1) Учет диффузии молекул полимера существенно ухудшает пространственную модуляцию концентрации дифракционной решетки по толщине образца. Это вполне понятно, так как роль диффузии молекул полимера увеличивается с уменьшением интенсивности света. 2) учет нелокальности, как и следовало ожидать, приводит к равномерному уменьшению глубины модуляции по всему образцу.

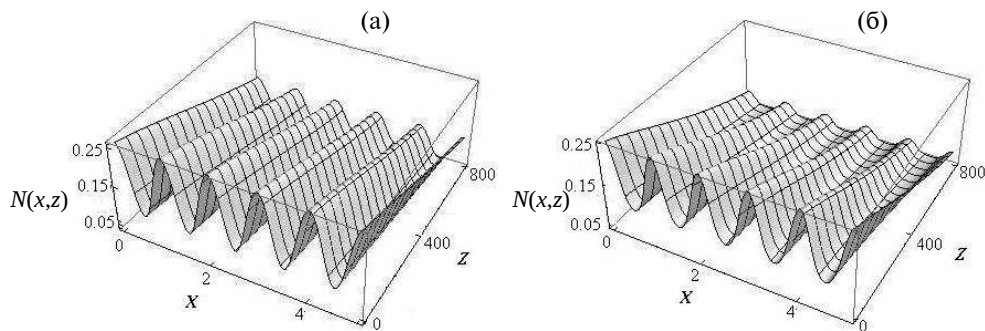


Рис.2. Локальная модель без учета (а) и с учетом (б) диффузии молекул полимера. Параметры имеют следующие значения: а) $D_p = 0$; $\alpha_p = 0$, $\sigma = 0$, б) $D_p = 0,003 \text{ мкм}^2/\text{с}$; $\alpha_p = 2$, $\sigma = 0$.

(а)

(б)

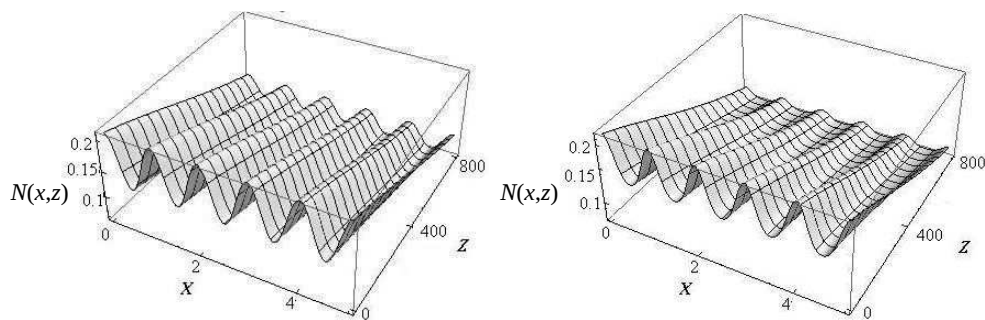


Рис.3. Нелокальная модель без учета (а) и с учетом (б) диффузии молекул полимера. Параметры имеют следующие значения: а) $D_p = 0$, $\alpha_p = 0$, $\sigma = 0,03 \text{ мкм}^2$, б) $D_p = 0,003 \text{ мкм}^2/\text{с}$; $\alpha_p = 5$, $\sigma = 0,03 \text{ мкм}^2$.

4. Заключение

Резюмируя, можно сказать, что описание процесса записи голографических решеток с большой пространственной модуляцией концентраций в слоях с учетом поглощения связано с определенными трудностями. В этом случае простая диффузионная модель процесса полимеризации оказывается недостаточной. Необходимо одновременно учитывать множество существующих факторов. К их числу относятся поглощение света, нелокальность процесса полимеризации, а также влияние диффузионных процессов молекул полимера.

Как показывает наш анализ, учет диффузионных процессов и нелокальности отклика значительно размывает картину и тем самым уменьшает пространственную модуляцию концентраций записываемой решетки, а в перспективе и объем записываемой информации. Поэтому для получения качественных дифракционных решеток в полимерных материалах необходимо выбрать такие компоненты, в которых вклад вышеуказанных процессов будет малым.

ЛИТЕРАТУРА

1. K.Okano, A.Shishido, O.Tsutsumi, T.Shiono, T.Ikeda. J. of Nonliniar Optical Physics & Materials, **12**, 539 (2003).
2. D.Duca, A.V.Sukhov, C.Umeton. Liquid Crystals, **26**, 931 (1999).
3. R.Sutherland, V. Tondiglia, L.Natarajan. Appl. Phys. Lett., **64**, 1074 (1994).
4. Y.Zhang, Z. Lu, X. Deng, Y.Liu, Y.Zhao. Optics Communication, **220**, 289, (2003).
5. S.Gallego, M.Ortuno, C.Neipp, et al. Optics Express, **13**, 1939 (2005).
6. G.Zhao, P.Mouroulis. J. Mod. Opt., **41**, 1929 (1994).
7. S.-D.Wu, E.N.Glytsis. J. Opt. Soc. Am. B, **20**, 127 (2003).
8. J.T.Sheridan, T.O.Neill, J.V.Kelly. J. Opt. Soc. Am., **21**, 1443 (2004).
9. Р.С.Акопян, А.Л.Асланян, А.В.Галстян. Изв. НАН Армении, Физика, **39**, 327 (2004).
10. S.Gallego, M.Ortucio, C.Neipp, et al. Optics Express, **13**, 3543 (2005).

ՊՈԼԻՄԵՐՆԵՐՈՒՄ ԴԻՍՊԵՐՍԿԱԾ ՀԵՂՈՒԿ ԲՅՈՒՐԵՂԱՅԻՆ ՄԻՋԱՎԱՅՐԵՐՈՒՄ
ՀԱՍՏ ԴԻՖՐԱԿՑԻՈՆ ՑԱՆՑԵՐԻ ԳՐՄԱՆ
ԵՌԱԶԱՓ ՈՉ ԼՈԿԱԼ ԴԻՖՈՒԶԻՈՆ ՄՈԴԵԼ

Ա.Լ. ԱՍԼԱՆՅԱՆ, Ա.Վ. ԳԱԼՍՏՅԱՆ, Ռ.Ս. ՀԱԿՈԲՅԱՆ

Ուսումնասիրված է պոլիմերներում դիսպերսված հեղուկ բյուրեղային միջավայրերում հոլո-գրաֆիական դիֆրակցիոն ցանցերի գրման դինամիկան կլանման առկայությամբ: Հաշվի են առնված ոչ միայն մոնոմերի, այլ նաև պոլիմերի մոլեկուլների դիֆուզիան, ինչպես նաև կլանման հետևանքով լուսավորման անհամասեռությունը նմուշի երկայնքով: Քննարկված է նաև պոլիմերացման պրոցեսի ոչ լոկալությունը:

NONLOCAL 3D DIFFUSION MODEL OF WRITING THICK DIFFRACTION GRATINGS IN
POLYMER-DISPERSED LIQUID CRYSTALS

A.L. ASLANYAN, A.V. GALSTYAN, R.S. HAKOBYAN

Dynamics of holographic diffraction grating recording process in polymer-dispersed liquid crystals with absorption is considered. Processes of diffusion of molecules not only of a monomer, but also of a polymer, as well as the influence of inhomogeneity of illumination inside the sample due to light absorption are considered. The role of nonlocality of polymerization process is taken into account also.

УДК 537.311

ВЛИЯНИЕ ВЗАИМНОЙ ДИФФУЗИИ АТОМОВ In И Al НА ЭКСИТОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$

В.Н. МУГНЕЦЯН, А.А. КИРАКОСЯН

Ереванский государственный университет, Армения

(Поступила в редакцию 11 февраля 2008 г.)

Исследовано влияние взаимной диффузии атомов алюминия и индия в квантовой точке $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$ на эмиссионную энергию и энергию связи экситона. Показано, что с увеличением диффузионной длины эмиссионная энергия монотонно увеличивается, в то время как энергия связи имеет максимум.

1. Введение

Взаимная диффузия составляющих компонент в низкоразмерных гетероструктурах, особенно в самоорганизованных квантовых точках (КТ), играет существенную роль ввиду большого значения отношения площади их поверхности к объему по сравнению с квантовыми ямами (КЯ) и проволоками (КП). Диффузия, индуцированная на послеростовом этапе, имеет важное значение, так как она способствует термической стабильности и увеличению времени функционирования приборов, созданных на основе квантовых гетероструктур. В настоящее время имеются многообещающие результаты, касающиеся применения термически индуцированной взаимной диффузии на послеростовом этапе с целью создания устройств с контролируруемыми параметрами [1-7].

Большой интерес как с точки зрения прикладной, так и фундаментальной физики представляет исследование влияния диффузии на оптические свойства гетероструктур. В работах [2,3,6,8] наблюдалось значительное голубое смещение пика и сужение ширины спектра фотолюминесценции, особенно ярко выраженные для КТ.

В работах [9,10] исследовано влияние взаимной диффузии примесей на зонную структуру и коэффициент поглощения света методом замены диффузионного потенциала модельным потенциалом Вуда–Саксона, для которого известны аналитическое решение уравнения Шредингера и спектр энергии. Это позволяет найти связь между диффузионной длиной и измеряемым на опыте голубым смещением фотолюминесценции [11-13].

Влияние экситонных эффектов на оптические свойства гетероструктур во многих случаях играет значительную роль и не может быть игнорировано [14,15]. В частности, в работе [14] показано, что диффузия примеси в КЯ $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}/\text{CdTe}$ приводит к увеличению эмиссионной энергии и к уменьшению энергии связи экситона.

В данной работе исследовано влияние диффузии атомов алюминия и индия в квантовой точке $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$ на эмиссионную энергию и энергию связи экситона на основе модельного потенциала Вуда–Саксона. Показано, что с увеличением диффузионной длины эмиссионная энергия монотонно увеличивается, в то время как энергия связи имеет максимум.

2. Теория

Гамильтониан рассматриваемой системы имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{e^2}{\chi |\vec{r}_e - \vec{r}_h|}, \quad (1)$$

где

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h} \nabla_h^2 + V_e + V_h \quad (2)$$

– гамильтониан в отсутствие взаимодействия между электроном и дыркой, V_e и V_h – диффузионные потенциалы в зоне проводимости и валентной зоне, соответственно [9], χ – диэлектрическая проницаемость системы, которую ввиду слабой зависимости от концентраций индия и алюминия [16,17] можно считать постоянной.

Заменой диффузионного потенциала потенциалом Вуда–Саксона можно получить аналитические выражения волновых функций, соответствующих гамильтониану $\hat{H}_0$ [18]:

$$\Psi_{e,h}(r_{e,h}, l) = \frac{N_0}{2\pi} \frac{f_{e,h}(r_{e,h}, l)}{r_{e,h}}, \quad (3)$$

где

$$f_{e,h}(r_{e,h}, l) = \eta(r_{e,h}, l)^{\nu(l)} [1 - \eta(r_{e,h}, l)]^{\mu(l)} {}_2F_1[\mu(l) + \nu(l), \mu(l) + \nu(l) + 1, 2\nu(l) + 1; \eta(r_{e,h}, l)], \quad (4)$$

$$\eta(r_{e,h}, l) = \left\{ 1 + \exp \left[(r_{e,h} - q(l)r_0) / \alpha(l)r_0 \right] \right\}^{-1}, \quad (5)$$

$$\nu_{e,h}(l) = \alpha(l) \gamma_{e,h} \epsilon_{e,h}(l)^{1/2}, \quad \mu_{e,h}(l) = i\alpha(l) \gamma_{e,h} \sqrt{u(l) - \epsilon_{e,h}(l)}, \quad \gamma_{e,h} = (2m_{e,h} V_{e,h}^0 r_0^2 / \hbar^2)^{1/2}, \quad (6)$$

$V_{e,h}^0$ – начальная глубина потенциальной ямы для электронов (e) и дырок (h), r_0 – начальный радиус ямы, $u(l)$, $q(l)$ и $\alpha(l)$ – параметры, входящие в потенциал Вуда–Саксона [9,18]:

$$W_{e,h}(r_{e,h}) = -V_{e,h}^0 u(l) \left\{ 1 + \exp \left[(r_{e,h} - q(l)r_0) / \alpha(l)r_0 \right] \right\}^{-1} \quad (7)$$

и являющиеся функциями безразмерной диффузионной длины $l = L_1 / r_0$ при фиксированном значении отношения диффузионных длин алюминия (L_2) и индия (L_1), $\epsilon_{e,h}(l) = |E_{e,h} / u(l) V_{e,h}^0|$, $E_{e,h}$ – энергия основного состояния электрона (дырки), N_0 – постоянная нормировки, ${}_2F_1(a, b, c; \eta)$ – гипергеометрическая функция [19].

Следуя вариационному принципу, выберем пробную волновую функцию в виде

$$\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h; \delta) = N(\delta) \psi_e(r_e, l) \psi_h(r_h, l) \exp(-\delta |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|), \quad (8)$$

где δ – вариационный параметр, $N(\delta)$ – постоянная нормировки.

Энергию экситонного состояния, входящую в определения эмиссионной энергии $E_{em} = E_g + E_{ex}$ (E_g – ширина запрещенной зоны $\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$) и энергии связи $E_b = E_e + E_h - E_{ex}$ [14,20], найдем из условия минимума среднего значения энергии по δ :

$$E_{ex} = \min_{\delta} \left\{ \int \Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h; \delta) \hat{H} \Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h; \delta) d\mathbf{r}_e d\mathbf{r}_h \right\}. \quad (9)$$

Минимальное значение энергии экситонного состояния (9) можно представить в виде

$$E_{ex} = E_e + E_h - K - P_e - P_h, \quad (10)$$

где

$$K(l, \delta_0) = \frac{N(\delta_0)^2 e^2}{\chi} \int \frac{\exp[-2\delta_0 |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|]}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} |\psi_e(r_e, l)|^2 |\psi_h(r_h, l)|^2 d\mathbf{r}_e d\mathbf{r}_h, \quad (11)$$

$$P_{e,h}(l, \delta_0) = \frac{\hbar^2 \delta_0^2}{2m_{e,h}} + \frac{N^2 \hbar^2 \delta_0}{m_{e,h}} \times \\ \times \int \frac{\exp[-2\delta_0 |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|]}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} |\psi_{h,e}(r_{h,e}, l)|^2 \psi_{e,h}^*(r_{e,h}, l) [(\mathbf{r}_{h,e} - \mathbf{r}_{e,h}) \nabla_{e,h} - 1] \psi_{e,h}(r_{e,h}, l) d\mathbf{r}_e d\mathbf{r}_h, \quad (12)$$

а δ_0 – значение параметра, соответствующее минимальному значению E_{ex} .

3. Обсуждение

На рис.1 представлены кривые зависимости эмиссионной энергии при экситонных переходах между электроном и тяжелой дыркой в КТ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$ радиусом 10.4 нм (эффективный боровский радиус электрона в GaAs) от диффузионной длины при одновременной диффузии атомов индия и алюминия для различных значений параметра L_2/L_1 и концентраций x и y .

Из рисунка видно, что кривые, соответствующие различным начальным концентрациям индия и алюминия, пересекаются. Такое поведение эмиссионной энергии обусловлено тем, что при одновременном увеличении начальных концентраций x и y вместе с понижением (повышением) дна зоны проводимости (валентной зоны) в области $r < r_0$ происходит его повышение (понижение) в области $r > r_0$. Из рис.1 следует также, что влиянием параметра L_2/L_1 на эмиссионную энергию, существенным при значениях $l \approx 1 \div 2$, можно пренебречь при относительно больших значениях диффузионной длины ($l \geq 5$), т.к. в этом случае значение эмиссионной энергии в КТ с увеличением диффузионной длины приближается к соответствующему значению для массивного образца $\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$ при любом значении отношения L_2/L_1 .

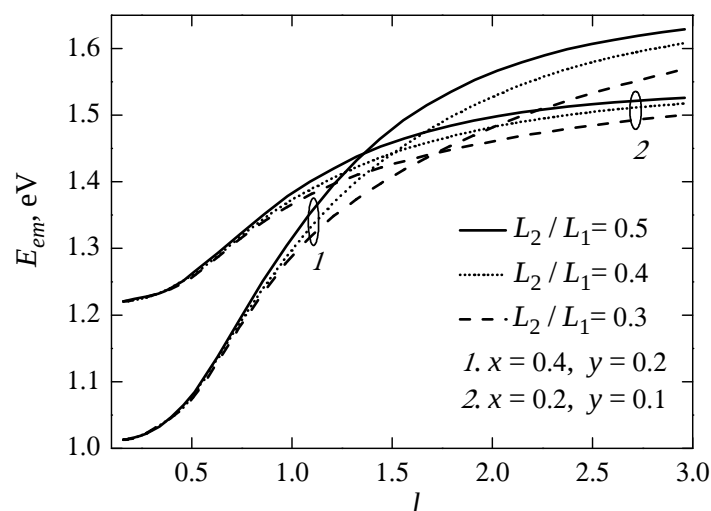


Рис.1. Зависимость эмиссионной энергии от диффузионной длины.

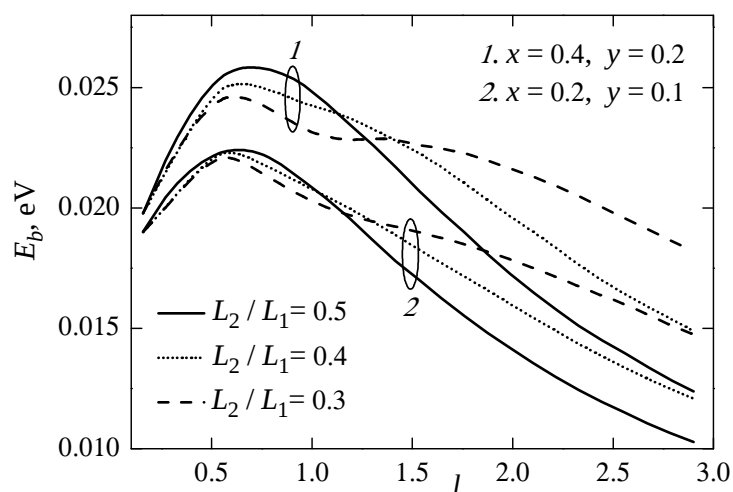


Рис.2. Зависимость энергии связи от диффузионной длины.

Увеличение эмиссионной энергии с увеличением диффузионной длины было получено в работе [14] для КЯ $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}/\text{CdTe}$: величина ее изменяется в пределах 1.6÷1.7 эВ. Сравнение полученных в нашей работе и в работе [14] результатов указывает на одинаковое поведение зависимостей эмиссионных энергий от диффузионной длины.

На рис.2 представлены кривые зависимости энергии связи экситона от диффузионной длины. Из рисунка можно заметить, что при фиксированном значении диффузионной длины увеличение начальных концентраций компонент приводит к росту энергии связи, что обусловлено усилением локализации электрона и дырки. Наличие максимума у кривых обусловлено тем, что в начальной стадии процесса диффузии степень локализации тяжелой

дырки значительно больше степени локализации электрона. Диффузия приводит к ослаблению этого различия и к увеличению степени перекрытия волновых функций частиц, вследствие чего энергия связи увеличивается. Дальнейшее увеличение диффузионной длины l приводит к размазыванию волновых функций электрона и тяжелой дырки и к уменьшению интеграла перекрытия, и следовательно, к уменьшению энергии связи экситона. Заметим, что как начальное увеличение, так и дальнейшее уменьшение энергии связи больше при больших значениях отношения L_2 / L_1 ввиду большей интенсивности диффузионного процесса, с чем и связано пересечение кривых, соответствующих различным значениям параметра L_2 / L_1 при определенном значении l .

ЛИТЕРАТУРА

1. R.Leon, S.Fafard, P.G.Piva, S.Ruvimov, Z.Liliental-Weber. Phys. Rev. B, **58**, R4262 (1998).
2. C.Lobo, R.Leon, S.Fafard, P.G.Piva. Appl. Phys. Lett., **72**, 2850 (1998).
3. Yalin Ji, Wei Lu, Guibin Chen, Xiaoshuang Chen, Qing Wang. J. Appl. Phys., **93**, 1208 (2003).
4. X.C.Wang, S.J.Xu, S.J.Chua, Z.H.Zhang, W.J.Fan, C.H.Wang, J.Jiang, X.G.Xie. J. Appl. Phys., **86**, 2687 (1999).
5. S.Fafard, C.Ni.Allen. Appl. Phys. Lett., **75**, 2374 (1999).
6. S.J.Xu, X.C.Wang. Appl. Phys. Lett., **72**, 3335 (1998).
7. K.Takeuchi, P.A.Moldauer. Phys. Lett. B, **28**, 384 (1969).
8. S.Malik, C.Roberts, R.Murray, M. Pate. Appl. Phys. Lett., **71**, 1987 (1997).
9. В.Н.Мугнецян, А.А.Киракосян. Изв. НАН Армении, Физика, **42**, 83 (2007).
10. В.Н.Мугнецян, А.А.Киракосян. Сборник трудов конференции “Лазерная Физика-2006”, Аштарак, 2007, с.173.
11. T.E.Schlesinger, T. Kuech. Appl. Phys. Lett., **49**, 519 (1986).
12. W.P.Gilllin, D.J.Dunstan, K.P.Homewood, L.K.Howard, B.J.Sealy. J. Appl. Phys., **73**, 3782 (1993).
13. R.Leon, D.R.M.Williams, J.Krueger, E.R.Weber, M.R.Melloch. Phys. Rev. B, **56**, R4336 (1997).
14. P.Harrison, W.E.Hagston, T.Stirner. Phys. Rev. B, **47**, 16404 (1993).
15. W.P.Gilllin, K.P.Homewood, L.K.Howard, M.T.Emeny. Superlatt. Microstruct, **9**, 39 (1991).
16. S.Adachi. J. Appl. Phys., **53**, R1 (1985).
17. S.Adachi. J. Appl. Phys., **66**, 6030 (1989).
18. З.Флюгге. Задачи по квантовой механике, т.1. М., Мир, 1974.
19. M.Abramowitz, I.A.Stegun. Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables. Washington D. C., 1964.
20. Z.Xiao. J. Appl. Phys., **86**, 4510 (1999).

Ին-Ի ԵՎ ԱԼ-Ի ԱՏՈՄՆԵՐԻ ՓՈԽԱԴԱՐՁ ԴԻՖՈՒԶԻԱՅԻ
ԱՉԴԵՑՈՒԹՅՈՒՆՆ ԷՔՍԻՏՈՆԱՅԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԻ ՎՐԱ
 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԿԵՏԵՐՈՒՄ

Վ.Ն. ՄՈՒՂՆԵՅՅԱՆ, Ա.Ա. ԿԻՐԱԿՈՍՅԱՆ

Ուսումնասիրված է ինդիումի և ալյումինիումի ատոմների փոխադարձ դիֆուզիայի ազդեցությունն էքսիտոնի առաքման էներգիայի և կապի էներգիայի վրա $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$ քվանտային կետում: Ցույց է տրված, որ դիֆուզիայի երկարության մեծացմանը զուգընթաց առաքման էներգիան մոնոտոն աճում է, մինչդեռ կապի էներգիան ունի մաքսիմում:

EFFECT OF INTERDIFFUSION OF In AND Al ATOMS
ON EXCITONIC STATES IN $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$ QUANTUM DOTS

V.N. MUGHNETSYAN, A.A. KIRAKOSYAN

The effect of interdiffusion of aluminum and indium atoms on the exciton emission energy and binding energy in $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$ quantum dots is studied. It is shown that with increasing diffusion length the emission energy increases monotonically, while the binding energy has a maximum.

УДК 621.315

ПЛЕНКИ ZnO:Li *p*-ТИПА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ *p-n*-ПЕРЕХОДОВ

Н.Р. АГАМАЛЯН, Р.К. ОВСЕПЯН, С.И. ПЕТРОСЯН

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак

(Поступила в редакцию 22 января 2008 г.)

Исследованы фотоэлектрические свойства пленок ZnO с акцепторной примесью ионов лития, полученные методом электронно-лучевого напыления. Получены пленки с *p*-типом проводимости. С использованием *p*-типа пленок ZnO:Li и *n*-ZnO:Ga созданы *p-n*-переходы. Изучены фотоэлектрические характеристики полученных *p-n*-переходов и механизм переноса носителей заряда в этих пленках. Исследовано влияние отжига на тип и механизм проводимости.

1. Введение

Пленки оксида цинка (ZnO), относящиеся к широкозонным полупроводникам и обладающие множеством интересных свойств, находят широкое применение в оптоэлектронике в качестве активного материала для светодиодов, работающих в синем-зеленом или УФ диапазонах. Эти пленки могут быть использованы для создания прозрачных дисплеев и прозрачной электроники для использования в этих дисплеях. Важным достоинством этих пленок является возможность управления их свойствами, типом проводимости и введением донорной или акцепторной примеси [1,2]. Примесь Ga в пленках ZnO действует как донор, увеличивая проводимость без ухудшения оптической прозрачности, в то время как примесь Li увеличивает их удельное сопротивление [3]. Создание пленок ZnO *p*-типа может расширить область их использования в оптоэлектронике. Метастабильные примесные центры привлекают внимание исследователей не только в связи со сложными физическими явлениями, сопутствующими их возникновению, но также из-за того влияния, которое они оказывают на полупроводник и его свойства. В частности, наиболее важными типами таких центров являются DX-центры и их акцепторные аналоги, AX-центры, препятствующие получению нужного типа и уровня проводимости в полупроводниках [4]. Такие центры являются основной причиной эффекта самокомпенсации в ZnO [5]. Эффект самокомпенсации примеси, который наблюдается в полупроводниках $A^{II}-B^{VI}$, препятствует получению высокопроводящих пленок *p*-ZnO. В настоящее время сложно создать широкозонный полупроводник *p*-типа с высокой проводимостью. Одним из наиболее интересных материалов является пленка ZnO, легированная ионами лития [6-8], однако недостаточно ясен механизм образования акцепторного центра в этом материале и влияние кислородных вакансий и AX и DX центров на механизм проводимости пленок *p*-типа.

Целью настоящей работы являлось исследование влияния акцепторной примеси лития в ZnO и послеростового отжига на тип и механизм проводимости, а также получение p – n -переходов на основе пленок p -ZnO:Li и n -ZnO:Ga. Представлены результаты исследований фотоэлектрических характеристик пленок обоих типов и p – n -переходов.

2. Эксперимент

Чистые и легированные литием пленки ZnO для фотоэлектрических измерений были получены методом электронно-лучевого напыления в вакууме [6] с использованием сапфировых пластин с ориентацией (0001) в качестве подложек. Мишени для напыления изготавливались методом твердофазного синтеза с добавлением в ZnO примеси Li_2O_3 . Концентрация лития в мишени составляла 1 at%. Все образцы были изготовлены в одинаковых условиях: энергия электронов была ~ 6 кэВ, температура подложки поддерживалась при $250 \pm 1^\circ\text{C}$ и скорость роста составляла 0.14 нм/с. Гетеропереходы были получены тем же методом: на подложку сначала напыляли проводник p -типа, а затем проводник n -типа. Для получения перехода при напылении использовались маски-трафареты. Был изготовлен p (n -переход с использованием мезотехнологии, на единой подложке были получены 5-6 планарных диодов с размерами перехода 800×400 мкм и толщиной пленок 350 нм. В качестве омических электродов использовались тонкие пленки металлического алюминия, которые были получены методом термического напыления. Для исключения десорбции(адсорбции кислорода и деградации поверхности p (n переход покрывался слоем MgF_2 [9]. Пленки MgF_2 были получены методом термического вакуумного напыления. Измерения проводимости были проведены на постоянном токе в частотном диапазоне 10 Гц–35 МГц. Частотные зависимости измерялись с помощью свип-генератора и синхронно-фазового детектора. Были проведены измерения вольт-амперных характеристик (ВАХ) переходов на постоянном токе. При измерении фототока освещался участок p (n -перехода. В качестве источников УФ излучения использовались светодиоды L-7113UV ($h\nu = 3.18$ эВ), и на поверхности пленки интенсивность излучения составляла 5.2 мВт/см². Регистрация электрического сигнала осуществлялась с использованием системы сбора данных и согласования сигнала (Data Acquisition Board) фирмы “National Instruments”. Было разработано математическое обеспечение и созданы виртуальные инструменты для измерения характеристик пленок. Холловская подвижность измерялась методом Ван-дер-Пау при напряженности магнитного поля 1(2 Т. Рентгеноструктурные исследования были проведены с помощью дифрактометра DRON с использованием излучения $\text{CuK}\alpha$ ($\lambda = 0.1540$ нм).

3. Результаты и их обсуждение

Методом электронно-лучевого напыления нами были получены пленки с кристаллографической осью (0002), перпендикулярной поверхности подложки (рис.1). Рентгеноструктурные исследования показали, что параметр решетки c пленок ZnO:Ga ($c = 0.5198$ нм) и ZnO:Li ($c = 0.5167$ нм) отличается незначительно, поэтому полученный p – n -переход можно считать гомопереходом.

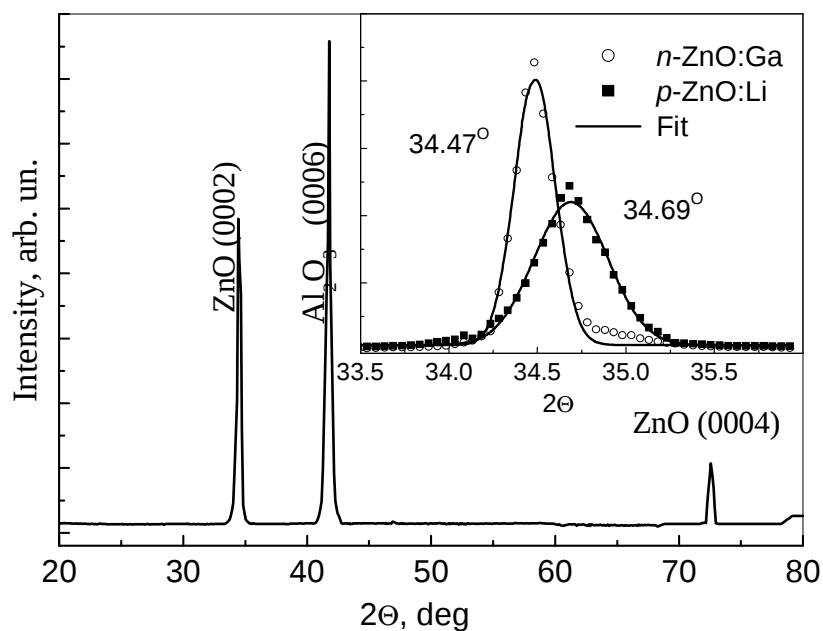


Рис.1. Рентгенограмма пленок ZnO; на вставке показан растянутый пик (0002) пленок ZnO:Li и ZnO:Ga.

На рис.2 приведены спектры пропускания пленок *n*-типа (ZnO:Ga) и *p*-типа (ZnO:Li), используемых в *p*(*n*-переходах, а также самого *p*(*n*-перехода. Сдвиг края поглощения для пленок ZnO:Ga (сдвиг Бурштейна(Мосса) [10] обусловлен увеличением концентрации носителей в зоне проводимости. Эти результаты показывают, что атомы Ga в ZnO являются донорами и увеличивают плотность электронов в зоне проводимости. Необходимо отметить, что эти структуры прозрачны в видимой области, и коэффициент пропускания в этой области выше 90%.

Как известно, в широкозонных полупроводниках движение носителей заряда осуществляется за счет двух механизмов (дрейфового и прыжкового [9-11]. В зависимости от концентрации носителей заряда и энергии активации донора или акцептора происходит изменение вклада каждого из механизмов в проводимость.

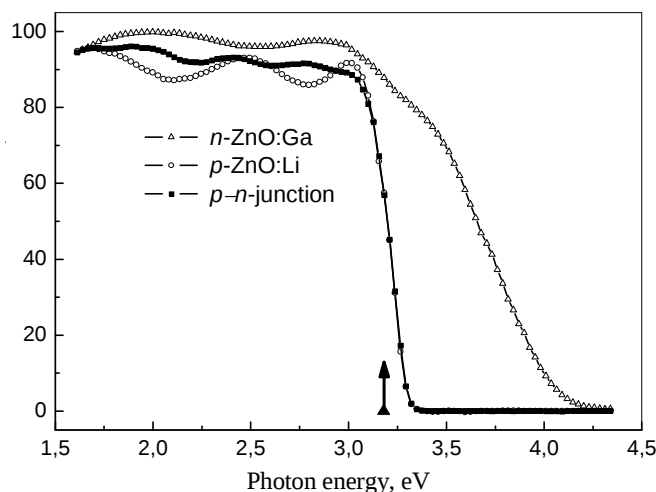


Рис.2. Спектры пропускания пленок ZnO:Ga, ZnO:Li и планарного p - n -перехода. Стрелкой указана энергия фотона, используемая для возбуждения фотопроводимости.

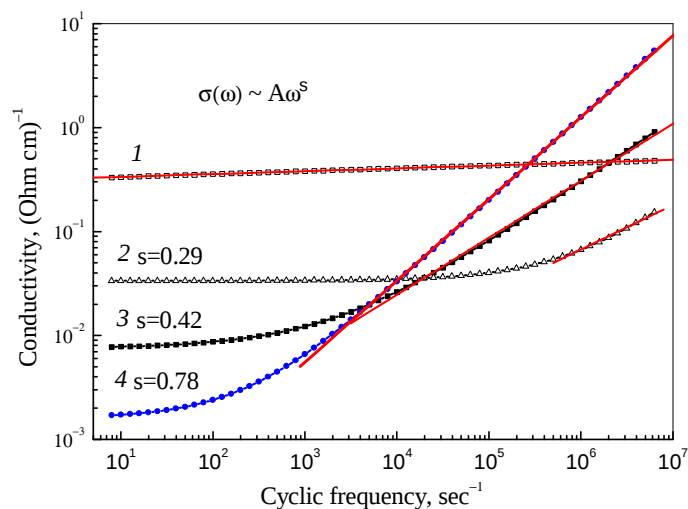


Рис.3. Частотная зависимость темновой проводимости пленок ZnO:Li: 1 - после напыления, 2-4 - прошедших отжиг на воздухе.

На рис.3 представлена частотная зависимость темновой проводимости для пленок ZnO:Li после напыления и для этих же пленок, прошедших отжиг на воздухе (табл.1). Пленки, полученные методом электронно-лучевого напыления, имеют дефицит кислорода, поэтому эти пленки после напыления имеют электронную проводимость. Полученные экспериментальные зависимости проводимости от частоты для неотожженных пленок (кривая 1) могут быть обусловлены дрейфовым механизмом переноса заряда. Это означает, что кривая 1 может быть аппроксимирована выражением $\sigma(\omega) = \sigma(0)/(1 + \omega^2\tau_D^2)$, где $\omega = 2\pi f$ - циклическая частота переменного электрического поля и τ_D - время релаксации Друде, которое для

легированных литием пленок ZnO:Li составляет $\sim 9 \times 10^{-11}$ с [3] и поэтому высокочастотный спад проводимости не наблюдается в наших экспериментах. После первого отжига на воздухе частотная зависимость проводимости пленок меняется, и она может быть описана прыжковым механизмом переноса заряда. Экспериментальные данные могут быть аппроксимированы типичной для прыжкового механизма переноса заряда зависимостью $\sigma(\omega) = \sigma(0) + A\omega^s$, где s - близкая к 0.8 величина и A - некая константа. Увеличение продолжительности отжига приводит к уменьшению проводимости и приближению величины s к теоретическому пределу 0.8. Пленки, не отожженные на воздухе или прошедшие первый отжиг, обладают проводимостью n -типа (табл.1) и донорная проводимость в ZnO с акцепторной примесью обусловлена самокомпенсацией примесного центра в этих пленках. Дальнейший отжиг приводит к изменению типа проводимости на акцепторный, а величина s приближается к теоретическому значению 0.8. Это означает, что перенос заряда осуществляется прыжковым механизмом по примесной зоне модели Хаббарда вблизи уровня Ферми [11]. В работах [12,13] наблюдался прыжковый механизм переноса, однако носителями заряда были электроны, в то время как в исследованных нами пленках носителями заряда являются дырки.

Табл.1. Параметры носителей заряда пленок ZnO:Li в зависимости от продолжительности и температуры отжига на воздухе.

	Продолжительность и температура отжига	Проводимость σ (Ohm cm) ⁻¹	Подвижность μ (cm ² /V s)	Концентрация носителей n (1/ cm ³)	Тип проводимости	Механизм проводимости
1	As-deposited	0.33	12.3	1.7×10^{17}	n	Дрейфовый
2	+300°C, 6 min	0.034	10.2	2.1×10^{16}	n	Дрейфовый
3	+300°C, 6 min	0.0077	6.2	7.7×10^{15}	p	Прыжковый
4	+300°C, 6 min	0.0017	8.6	1.3×10^{15}	p	Прыжковый
5	+400°C, 60 min	0.00052	80	4.1×10^{13}	n	Прыжковый

Дальнейший отжиг на воздухе (табл.1) приводит к изменению типа проводимости на электронный, а механизм движения носителей заряда остается прежним - прыжковым. Уменьшение кислородных вакансий приводит к самокомпенсации акцепторной примеси и изменению типа проводимости. Можно предположить, что при определенной концентрации кислородных вакансий наблюдается проводимость p -типа, и комплексы вакансии кислорода-иона лития превращаются в акцепторные центры. В пленках с большой или слишком малой концентрацией кислородных вакансий наблюдается электронная проводимость. Пленки ZnO:Ga обладают дрейфовой проводимостью n -типа независимо от режима послеростовой термообработки.

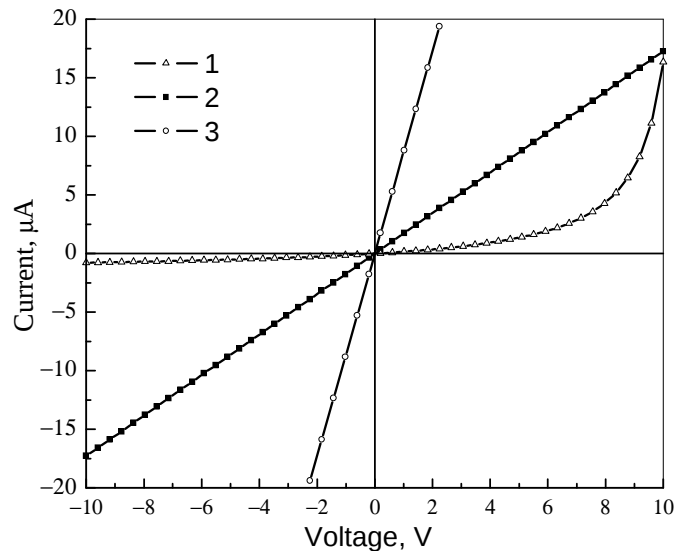


Рис.4. ВАХ перехода металл(полупроводник Al | p-ZnO:Li, Al | p-ZnO:Ga, 1- контакт Шоттки имеет нелинейную ВАХ, 2- после отжига имеем омический контакт, 3- омический контакт к пленкам n-Zn O:Ga.

На рис.4 представлены вольт-амперные характеристики перехода Шоттки металл-полупроводник в структурах Al|ZnO:Li и Al|ZnO:Ga. Переход Al|ZnO:Li имеет нелинейную ВАХ и является неомическим контактом. После отжига (табл.1) переход становится омическим. Переход Al|ZnO:Ga был и остается омическим независимо от дополнительной термической обработки.

Темновые и фото-вольт-амперные характеристики гомопереходов p-ZnO:Li/n-ZnO:Ga имели нелинейный характер (рис.5). Освещение приводит к появлению фотогальванического режима работы перехода. Излучение полностью проходит через n-слой (рис.2) и поглощается в p-слое, то есть неравновесные носители образуются в области перехода. Полученные ВАХ были аппроксимированы выражением $I = I_s \left[\exp\left(\frac{qV}{nk_B T}\right) - 1 \right]$ и $I = I_s \left[\exp\left(\frac{qV}{nk_B T}\right) - 1 \right] - I_F$ и для неосвещенного и освещенного переходов, соответственно, где I_s (ток насыщения, кВ - постоянная Больцмана, V – напряжение, n – коэффициент идеальности, T – температура и I_F – ток, обусловленный фотовозбуждением носителей заряда и зависящий от интенсивности света. Обычно, коэффициент идеальности n принимает значения между 1 (для диффузионного тока) и 2 (для рекомбинационного тока) [В полученных p(n)-переходах на основе ZnO нелинейность при малых напряжениях обусловлена рекомбинационным током, т.е. $n = 2$, а при высоких напряжениях нелинейность обусловлена диффузионным током, т.е. $n = 1$. Между двумя участками ВАХ, соответствующими $n = 1$ и $n = 2$, наблюдались участки с промежуточными, дробными значениями n , что объясняется рекомбинацией носителей в слое объемного заряда через многозарядные глубокие центры [15], присутствующие в пленках ZnO.

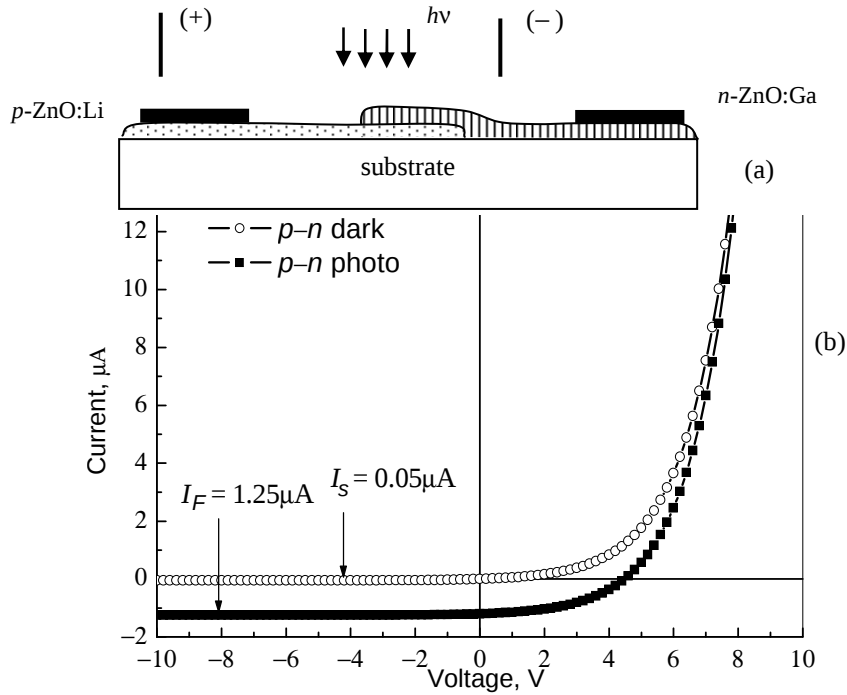


Рис.5. Структурная схема планарного диода (а) и вольтамперные характеристики неосвещенного и освещенного p - n -перехода (b).

Постоянная времени фотодиодов τ описывается выражением $\tau^2 = \tau_c^2 + \tau_d^2 + \tau_{RC}^2$, где τ_c – время переноса заряда электрическим полем через обедненную область, τ_d – время диффузии фотовозбужденного электрона от места его генерации до слоя объемного заряда и τ_{RC} – постоянная времени RC-цепи и самой структуры. Для p - n -переходов $\tau_c = W/V_s$, где W – ширина слоя объемного заряда, V_s – скорость дрейфа (для переходов на основе ZnO это время $\sim 10 \div 100$ нс). Для широкозонных полупроводников $\tau_{RC} < \tau_c < \tau_d$ и как следствие $\tau \approx \tau_d$, т.е. постоянная времени фотодиода определяется временем диффузии фотовозбужденного электрона от места его генерации до слоя объемного заряда. При оптимальной геометрии быстродействие диодов на основе ZnO может достигнуть $\sim 10^{-6}$ с, что по порядку величины совпадает с временем релаксации носителей по энергии для пленок ZnO.

Зависимость переменной составляющей фототока от частоты амплитудной модуляции ω излучения описывается выражением $I_\omega = I_0 / [1 + (\omega\tau)^2]$. На рис.6 приведены нормированные частотные характеристики фоторезистора на основе МПМ-структуры Al|ZnO:Li|Al и p - n -перехода p -ZnO:Li/ n -ZnO:Ga. Аппроксимацией полученных экспериментальных зависимостей были определены постоянные времени τ для МПМ-структур и p - n -перехода. Постоянная времени τ фотодиодов на основе p - n -перехода намного меньше, чем постоянная времени фоторезисторов на основе МПМ-структур при использовании аналогичных пленок ZnO.

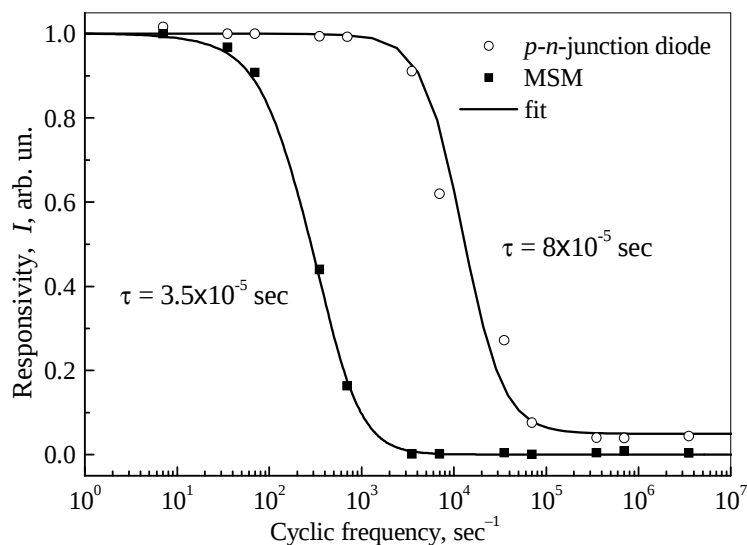


Рис.6. Нормированная частотная характеристика фоторезистора на основе МПМ-структуры Al | ZnO:Li | Al и *p-n*-перехода на основе пленок *p*-ZnO:Li и *n*-ZnO:Ga.

4. Заключение

В результате легирования ZnO ионами лития получены пленки с электронной или дырочной проводимостью в зависимости от соотношения кислород(литий). Пленки ZnO:Li после получения имели существенный недостаток кислорода, что приводило к самокомпенсации акцепторной примеси. В этих пленках наблюдался дрейфовый механизм переноса заряда. Увеличение концентрации кислорода приводит к изменению типа проводимости на дырочный и механизма переноса носителей заряда на прыжковый. Получены пленки ZnO с *p*-типом проводимости. На основе этих пленок созданы гетеропереходы *n*-ZnO:Ga/*p*-ZnO:Li.

Работа поддержана фондами CRDF-NFSAT (грант No ARE2-3238-AS-04) и ANSEF (грант No PS-condmatex-785).

ЛИТЕРАТУРА

1. T.Yamamoto, H.Katayama-Yoshida. J. Cryst. Growth, **214/215**, 552 (2000).
2. T.Yamamoto, H.Katayama-Yoshida. Mater. Res. Soc. Proc., **623**, 223 (2000).
3. N.R.Aghamalyan, I.A.Gambaryan, E.Kh.Goulanian, R.K.Hovsepyan, R.B.Kostanyan, S.I.Petrosyan, E.S.Vardanyan, A.F.Zerrouk. Semicond. Sci. Technol., **18**, 525 (2003).
4. П.Ю. М.Кардона. Основы физики полупроводников. М., Физматлит, 2002.
5. Д.Е.Онопко, АИ.Рыскин. ФТП, **35**, 1281 (2001).
6. N.R.Aghamalyan, E.A.Kafadaryan, R.K.Hovsepyan, S.I.Petrosyan. Semicond. Sci. Technol., **20**, 80 (2005).
7. M.G.Wardle, J.P.Gross, P.R.Bridson. Phys. Rev., **B71**, 155205 (2005).
8. E-C.Lee, K.J.Cang. Phys. Rev., **B70**, 115210 (2004).
9. Н.Р.Агамян, Р.К.Овсепян. Изв. НАН Армении, Физика, **43**, 143 (2008).

10. **Н.Р.Агамалян, Р.К.Овсебян, Е.А.Кафадарян, Р.Б.Костанян, С.И.Петросян, Г.О.Ширинян, М.Н.Нерсисян, А.Х. Абдуев, А.Ш. Асваров.** Изв. НАН Армении, Физика, **43**, 224 (2008).
11. **Н.Мотт, Э.Дэвис.** Электронные процессы в некристаллических веществах. М., Мир, 1982.
12. **Y.Natsume, H.Sakata.** Journal of materials science: Materials in electronics, **12**, 87 (2007).
13. **N.R.Aghamalyan, R.K.Hovsepyan, A.R.Poghosyan, B. von Roedern, E.S.Vardanyan.** Journal of Optoelectronics and Advanced Materials. **9**, 1418 (2007).
14. **С.Зи.** Физика полупроводниковых приборов. М., Мир, 1982.
15. **О.Lopatiuk, L.Chernyak.** Appl. Phys. Lett., **87**, 214110 (2005).

p-ՏԻՊԻ ZnO:Li ԹԱՂԱՆԹՆԵՐ *p-n* ԱՆՅՈՒՄՆԵՐ ՍՏԱՆԱԼՈՒ ՀԱՄԱՐ

Ն.Ռ. ԱՂԱՄԱԼՅԱՆ, Ռ.Կ. ՀՈՎՍԵՓՅԱՆ, Ս.Ի. ՊԵՏՐՈՍՅԱՆ

Հետազոտված են լիթիումի իոնների ակցեպտորային խառնուրդով ZnO թաղանթների լուսա-էլեկտրական հատկությունները, որոնք ստացվել են էլեկտրոնաճառագայթային փոշենստեցումով: Ստացված են *p*-տիպի հաղորդականությամբ թաղանթներ: *p*-տիպի ZnO:Li և *n*-ZnO:Ga թաղանթների օգտագործումով ստեղծված են *--n* անցումներ: Ուսումնասիրված են ստացված *p-n* անցումների լուսաէլեկտրական բնութագրերը և այդ թաղանթներում լիցքակիրների տեղափոխման մեխանիզմը: Հետազոտված է ջերմամշակման ազդեցությունը հաղորդականության տիպի և մեխանիզմի վրա:

p-TYPE ZnO FILMS FOR PREPARATION OF *p-n*-JUNCTIONS

N.R. AGHAMALYAN, R.K. HOVSEPYAN, S.I. PETROSYAN

Photoelectrical properties of ZnO films doped with Li acceptor impurity and prepared by electron-beam evaporation method were investigated. The obtained films possessed *p*-type conductivity. Using *p*-ZnO:Li and *n*-ZnO:Ga films, *p-n*-junctions were created and photoelectric characteristics of obtained *p-n* junctions were investigated. The mechanism of charge carrier transport in these films and influence of annealing on the type and mechanism of conductivity were studied.

УДК 621.382

ВРЕМЯ ЖИЗНИ НЕРАВНОВЕСНЫХ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В БАЗЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО ДИОДА С p - n -ПЕРЕХОДОМ ПРИ ПРОИЗВОЛЬНЫХ УРОВНЯХ ИНЖЕКЦИИ

Н.С. АРАМЯН

Институт радиофизики и электроники НАН Армении, Аштарак

(Поступила в редакцию 16 марта 2008 г.)

В приближении экспоненциальности распределения неравновесных носителей в базе полупроводникового диода с p - n -переходом получена формула для расчета времени жизни, пригодная при произвольных уровнях инжекции. Время жизни определяется на основе измерений одних лишь стационарных характеристик диода (ВАХ на постоянном токе и дифференциального сопротивления на низкой частоте). Проведены измерения ВАХ и дифференциального сопротивления сплавных диодов Д226Б, для определения равновесной концентрации носителей в базе диода измерена также зависимость барьерной емкости от обратного напряжения. Вычисленная на основе экспериментальных данных зависимость времени жизни неравновесных носителей от уровня инжекции согласуется с теорией рекомбинации Шокли–Рида, что можно считать обоснованием допущений, принятых при расчете времени жизни носителей.

1. Введение

Исследование времени жизни неравновесных носителей в полупроводниках является актуальным с точки зрения выяснения механизмов рекомбинации носителей и определения параметров рекомбинационных центров [1–3]. Разработан ряд методов определения времени жизни [4–6], таких как измерение фотопроводимости при импульсном освещении полупроводника, измерение эдс и тока фотомагнитоэлектрического эффекта, измерение времени восстановления обратного сопротивления в полупроводниковом диоде с p - n -переходом. Для сравнения экспериментальных результатов с теорией рекомбинации Шокли–Рида важное значение имеет зависимость времени жизни от концентрации неравновесных носителей. С этой точки зрения наиболее удобен для измерений полупроводниковый диод с p - n -переходом, т.к. концентрацию неравновесных носителей в таком диоде можно контролировать приложенным к p - n -переходу напряжением. Нам известна работа [7], в которой видоизмененным методом обратного восстановления определяется зависимость времени жизни от уровня инжекции и на этой основе проводится сравнение теории с экспериментом.

Определение времени жизни в базе полупроводникового диода с p - n -переходом можно существенно упростить, если иметь в виду, что не только переходные характеристики диода, но и стационарные характеристики зависят от этого времени – в частности, вольт-

амперная характеристика (ВАХ) на постоянном токе. Однако сама ВАХ при произвольных уровнях инжекции трудно поддается точному расчету, и приближенный расчет строится на предположении об экспоненциальности распределения неравновесных носителей вдоль базы диода при произвольных уровнях инжекции. Если ограничиться рассмотрением времени жизни и уровня инжекции только на границе p - n -перехода, то, по-видимому, необходимость точного расчета ВАХ отпадает, а измерения ВАХ и дифференциального сопротивления диода могут использоваться для определения падения напряжения на базе диода, диффузионной длины и электрического поля около границы p - n -перехода. Эти последние позволят затем определить уровень инжекции и время жизни неравновесных носителей.

Целью настоящей работы являлось: а) с использованием распределения неравновесных носителей, спадающего по экспоненте вдоль базы диода, получение формулы для времени жизни, пригодной при низких и высоких уровнях инжекции; б) проведение измерений ВАХ и дифференциального сопротивления кремниевых сплавных диодов Д226Б, смещенных в прямом направлении, с целью определения уровней инжекции и времени жизни в базе диода. Проведено также измерение барьерной емкости p - n -перехода в зависимости от обратного напряжения и определена равновесная концентрация носителей в базе диода.

2. Расчет времени жизни

Рассмотрим резкий p - n -переход с базой n -типа, каковыми являются использованные нами сплавные диоды Д226Б. Выбор данных диодов обусловлен тем, что их конструкция и технология изготовления хорошо известны и описаны в литературе [8], движение инжектированных носителей в базе этих диодов можно приближенно считать одномерным. Направим ось x вдоль базы диода, а точку $x = 0$ совместим с границей перехода со стороны базы. Уравнения непрерывности электронов и дырок для стационарных условий имеют вид [9]

$$\begin{aligned} D_n \frac{d^2(\Delta n)}{dx^2} + \mu_n E \frac{d(\Delta n)}{dx} + \mu_n (n_0 + \Delta n) \frac{dE}{dx} - \frac{\Delta n}{\tau} &= 0, \\ D_p \frac{d^2(\Delta p)}{dx^2} - \mu_p E \frac{d(\Delta p)}{dx} - \mu_p (p_0 + \Delta p) \frac{dE}{dx} - \frac{\Delta p}{\tau} &= 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь Δn и Δp – избыточные концентрации электронов и дырок; n_0 и p_0 – равновесные концентрации; D_n и μ_n – коэффициент диффузии и подвижность электронов; D_p и μ_p – те же параметры для дырок; $E(x)$ – электрическое поле в базе диода; τ – время жизни неравновесной электронно-дырочной пары. Предполагается, что концентрация рекомбинационных ловушек мала по сравнению с избыточной концентрацией электронов и дырок и условие электронейтральности имеет вид

$$\Delta n = \Delta p. \quad (2)$$

В этих условиях рекомбинация неравновесных носителей должна описываться теорией Шокли–Рида [10]. Если выразить поле $E(x)$ через ток I и избыточную концентрацию инжектированных дырок $\Delta p(x)$, то с учетом условия (2) из второго уравнения

системы (1) можно получить уравнение для концентрации избыточных дырок $\Delta p(x)$ [11]. Это последнее представляет из себя однородное нелинейное дифференциальное уравнение второго порядка с переменными коэффициентами, точно решить которое не представляется возможным. Хорошо известно [10], что при низких уровнях инжекции это уравнение сводится к простому уравнению диффузии, решением которого является экспоненциально спадающая вдоль базы функция:

$$\Delta p(x) = \Delta p(0) \frac{\operatorname{sh}\left(\frac{w-x}{L_p}\right)}{\operatorname{sh}\left(\frac{w}{L_p}\right)}, \quad (3)$$

где $\Delta p(0)$ – избыточная концентрация дырок при $x=0$; w – длина базы диода; L_p – диффузионная длина дырок. В [11] показано, что при высоких уровнях инжекции решение также представляется экспонентой с диффузионной длиной, зависящей от поля в базе. Можно полагать, что при произвольных уровнях инжекции распределение избыточных носителей подобно формуле (3), в которую введен параметр α , имеющий смысл обратной диффузионной длины:

$$\Delta p(x) = \Delta p(0) \frac{\operatorname{sh}[\alpha(w-x)]}{\operatorname{sh}(\alpha w)}. \quad (4)$$

Физически ясно, что параметр α должен зависеть от избыточной концентрации дырок Δp и от электрического поля в базе E , т.е. этот параметр должен зависеть от x . При малых x вблизи границы p - n -перехода параметр α должен иметь фиксированное значение, определяемое избыточной концентрацией $\Delta p(0)$ и электрическим полем $E(0)$ при $x=0$. При малых x , когда $\alpha x \ll 1$, из (4) получаем:

$$\begin{aligned} \Delta p(x) &\approx \Delta p(0) [1 - (\alpha x) \coth(\alpha w)], \\ \Delta p'(x) &\approx -\Delta p(0) \alpha [\coth(\alpha w) - \alpha x], \\ \Delta p''(x) &\approx \Delta p(0) \alpha^2 [1 - (\alpha x) \coth(\alpha w)]. \end{aligned} \quad (5)$$

Поскольку мы полагаем функцию $\Delta p(x)$ известной, то в системе уравнений (1) неизвестными остаются функция $E(x)$ и параметр τ . Подстановка формул (5) в (1) приводит к новой системе двух уравнений для неизвестной функции $E(x)$ и параметра τ . Комбинируя эти два уравнения, получаем уравнение для $E(x)$ [12]:

$$\begin{aligned} \left\{ 1 + \frac{b+1}{b} \frac{\Delta p(0)}{n_0} [1 - (\alpha x) \coth(\alpha w)] \right\} \frac{dE}{dx} = \\ = \frac{b+1}{b} \frac{\Delta p(0)}{n_0} (\alpha) \coth(\alpha w) E(x) - \frac{kT}{q} \frac{b-1}{b} \frac{\Delta p(0)}{n_0} \alpha^2 \end{aligned} \quad (6)$$

с граничным условием $E = E(0)$ при $x=0$. Данное уравнение справедливо при малых x вблизи границы p - n -перехода. Решение уравнения (6) имеет следующий вид

$$E(x) = \frac{E(0) - \frac{\frac{kT}{q}(b-1)\alpha}{(b+1)\coth(\alpha w)}}{1 - \frac{\frac{b+1}{b} \frac{\Delta p(0)}{n_0} (\alpha) \coth(\alpha w)}{1 + \frac{b+1}{b} \frac{\Delta p(0)}{n_0}}} + \frac{\frac{kT}{q}(b-1)\alpha}{(b+1)\coth(\alpha w)} . \quad (7)$$

Формула (7) справедлива вблизи границы $p-n$ -перехода как для «длинных» диодов ($\alpha w \gg 1$), так и для «коротких» диодов ($\alpha w \ll 1$). Из (7) видно, что в случае «длинных» диодов при относительно низких уровнях инжекции, когда

$E(0) < \frac{kT}{q}(b-1)\alpha / (b+1)\coth(\alpha w)$, поле вглубь базы с ростом x убывает; при

$E(0) > \frac{kT}{q}(b-1)\alpha / (b+1)\coth(\alpha w)$ поле вглубь базы возрастает; а при $E(0) = \frac{kT}{q}(b-1)\alpha / (b+1)\coth(\alpha w)$

поле постоянно вдоль базы, т.е. не зависит от x . В случае «коротких» диодов поле вглубь базы возрастает практически при любых уровнях инжекции. Используя выражение (7) для функции $E(x)$, можно из одного из уравнений вышеназванной новой системы получить формулу для времени жизни τ при $x=0$, т.е. у границы $p-n$ -перехода:

$$\tau = \frac{b \left[1 + \frac{b+1}{b} \frac{\Delta p(0)}{n_0} \right]}{(\mu_n \alpha) \coth(\alpha w) E(0) + \mu_n \frac{kT}{q} \alpha^2 \left[1 + 2 \frac{\Delta p(0)}{n_0} \right]} . \quad (8)$$

Для практического использования формулы (8) необходимо знание величин α и $E(0)$ при произвольных уровнях инжекции, т.е. при произвольных $\Delta p(0)/n_0$. Эти величины можно определить, исходя из следующего. Для p^+-n -перехода электронный ток у границы перехода ($x=0$) должен равняться нулю [10], что выражается уравнением

$$q\mu_n [n_0 + \Delta n(0)] E(0) + qD_n \frac{d(\Delta n)}{dx} = 0 , \quad (9)$$

где q – заряд электрона. У той же границы перехода при $x=0$ весь ток переносится дырками, т.е.

$$\frac{I}{S} = q\mu_p \Delta p(0) E(0) - qD_p \frac{d(\Delta p)}{dx} , \quad (10)$$

где I – полный ток через переход, S – площадь перехода. Из уравнений (9) и (10) с использованием (5) получаются уравнения для α и $E(0)$:

$$\alpha \coth(\alpha w) = \frac{I}{S} \frac{b}{qn_0\mu_n} \frac{q}{kT} \frac{1 + \frac{\Delta p(0)}{n_0}}{\frac{\Delta p(0)}{n_0} \left[1 + 2 \frac{\Delta p(0)}{n_0} \right]}, \quad (11)$$

$$E(0) = \frac{kT}{q} \alpha \frac{\frac{\Delta p(0)}{n_0}}{1 + \frac{\Delta p(0)}{n_0}} \coth(\alpha w). \quad (12)$$

Для определения неравновесной концентрации дырок $\Delta p(0)$ используем выражение

$$\Delta p(0) = p_0 e^{\frac{qU_{p-n}}{kT}} = p_0 e^{\frac{q(U_d - U_b)}{kT}}, \quad (13)$$

где U_{p-n} – напряжение на $p-n$ -переходе; U_d – измеренное напряжение на диоде; U_b – падение напряжения на базе. Для расчетов по формуле (13) необходимо знание U_b . Выражение для напряжения на базе имеет вид

$$U_b = \int_0^I r_b dI = \int_0^I \left[r_d - \frac{kT}{qI} \frac{2 \left(\frac{\Delta p(0)}{n_0} \right)^2 + 3 \frac{\Delta p(0)}{n_0} + 1}{2 \left(\frac{\Delta p(0)}{n_0} \right)^2 + 4 \frac{\Delta p(0)}{n_0} + 1} \right] dI, \quad (14)$$

где $\frac{kT}{qI} \frac{2 \left(\frac{\Delta p(0)}{n_0} \right)^2 + 3 \frac{\Delta p(0)}{n_0} + 1}{2 \left(\frac{\Delta p(0)}{n_0} \right)^2 + 4 \frac{\Delta p(0)}{n_0} + 1}$ – дифференциальное сопротивление $p-n$ -пере-

хода при произвольных уровнях инжекции (эта формула получается из рассмотрения тока через переход с учетом дрейфовой составляющей тока дырок); r_b – дифференциальное сопротивление базы диода; r_d – измеренное дифференциальное сопротивление диода; I – ток через диод. Если измерения дифференциального сопротивления диода проводить ступенчато, малыми шагами по току ($I_m - I_{m-1}$), то в (14) интегрирование можно заменить суммированием, что приводит к формуле

$$U_{bm} = U_{b(m-1)} + \frac{1}{2} \left(r_{m-1} - \frac{kT}{qI_{m-1}} \frac{2y_{m-1}^2 + 3y_{m-1} + 1}{2y_{m-1}^2 + 4y_{m-1} + 1} \right) (I_m - I_{m-1}) + \frac{1}{2} \left(r_m - \frac{kT}{qI_m} \frac{2y_m^2 + 3y_m + 1}{2y_m^2 + 4y_m + 1} \right) (I_m - I_{m-1}). \quad (15)$$

Из соотношения (13) можно получить:

$$\frac{kT}{q} \ln(y_m) + U_{bm} - U_m + \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{n_0}{p_0}\right) = 0. \quad (16)$$

В формулах (15) и (16) I_m – m -тое измеренное значение тока; U_m – m -тое измеренное значение напряжения на диоде; U_{hm} – падение напряжения на базе при токе I_m ; $y_m = (\Delta p(0)/n_0)_m$ – уровень инжекции при токе I_m . Уравнения (15) и (16) использовались нами для определения зависимостей падения напряжения на базе U_b и уровня инжекции $\Delta p(0)/n_0$ от тока I , при этом достаточно было иметь данные измерений ВАХ диода на постоянном токе и дифференциального сопротивления диода на низкой частоте. В итоге из уравнений (11) и (12) находились параметры α и $E(0)$, а по формуле (8) вычислялось время жизни τ .

3. Измерения и результаты

Измерения ВАХ и дифференциального сопротивления исследуемых диодов, смещенных в прямом направлении, а также барьерной емкости при обратных смещениях проводились по схемам, показанным на рис.1 и 2. При измерении по схеме рис.1 через образец пропусклся постоянный ток в прямом направлении и одновременно подавался малый переменный сигнал с эффективным значением 0,5 мВ и частотой 1 кГц. Измерялась также величина переменного тока через образец, и затем вычислялось дифференциальное сопротивление. Для обеспечения повторяемости результатов образец термостатировался при $\sim 45^\circ\text{C}$. Измерение барьерной емкости (рис.2) использовалось для определения концентрации равновесных носителей μ_0 в базе диода. На образец, смещенный в обратном направлении, подавался малый переменный сигнал с эффективным значением 10 мВ. Измерительный сигнал с токового сопротивления r усиливался усилителем 1 и подавался на вход сравнивающего каскада 4. На второй вход этого каскада через усилитель 2 и фазовращатель 3 подавался компенсирующий сигнал для компенсации активной составляющей сигнала на токовом сопротивлении r , что позволяло измерить емкостную составляющую в «чистом» виде. Перед измерением емкостной составляющей вместо образца подключалось активное сопротивление, показанное на рис.2 пунктиром, и настраивалась фаза компенсирующего сигнала. Образец помещался в термостат при температуре $\sim 45^\circ\text{C}$.

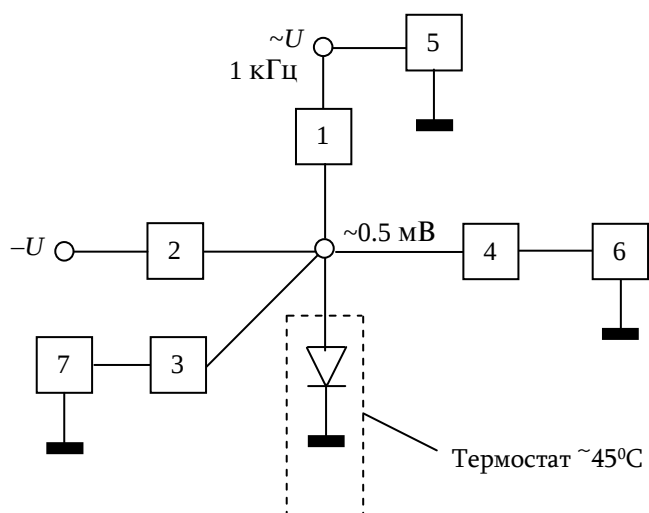


Рис.1. Схема измерения ВАХ и дифференциального сопротивления диода, смещенного в прямом направлении. 1, 2, 3 – буферы, служащие для развязки цепей постоянного и переменного тока; 4 – усилитель; 5, 6 – милливольтметры переменного тока; 7 – вольтметр постоянного тока. Образец термостатировался при $\sim 45^{\circ}\text{C}$.

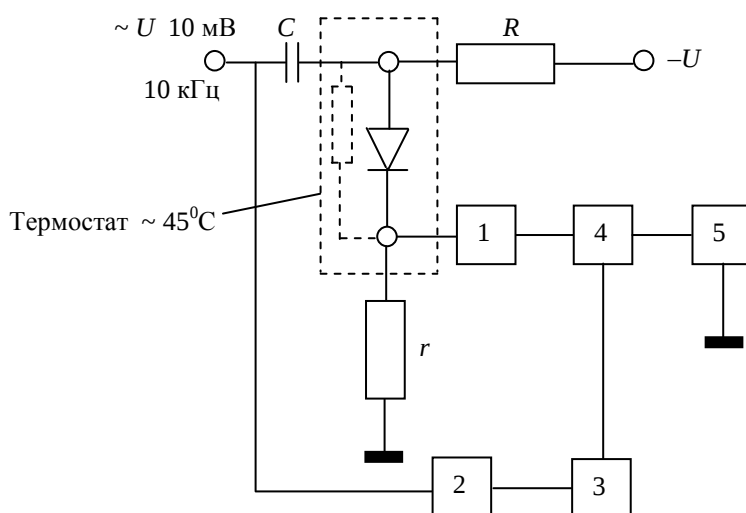


Рис.2. Схема измерения барьерной емкости на частоте 10 кГц. R и C – развязывающие сопротивление и емкость; r – малое прецизионное сопротивление; 1 и 2 – усилители; 3 – фазовращатель; 4 – сравнивающий каскад; 5 – милливольтметр переменного тока. Образец термостатировался при $\sim 45^{\circ}\text{C}$.

Для вычисления на основе результатов измерений необходимых параметров полупроводникового диода визуально под микроскопом определялись площадь p - n -перехода S и длина базы W , которые составляли

$S \approx 175 \times 10^{-8} \text{ м}^2$ и $W \approx 400 \text{ мкм}$. Измеренное значение концентрации электронов в базе составляло $n_0 = 3,5 \times 10^{13} \text{ см}^{-3}$. Измерения проводились с тремя диодами Д226Б, ниже приводятся результаты для одного из них. На рис.3 приведена зависимость падения напряжения на базе от тока через диод (кривая 1), рассчитанная по формулам (15) и (16) с использованием результатов измерений. Там же показана зависимость (кривая 2), рассчитанная с использованием выражения для сопротивления базы постоянному току при произвольных уровнях инжекции [10], в котором время жизни τ предполагается не зависящим от уровня инжекции. Меньшие значения напряжения на базе экспериментальной кривой по сравнению с рассчитанной при высоких уровнях инжекции можно объяснить уменьшением времени жизни инжектированных носителей с увеличением уровня инжекции, в результате чего ослабляется эффект модуляции проводимости базы.

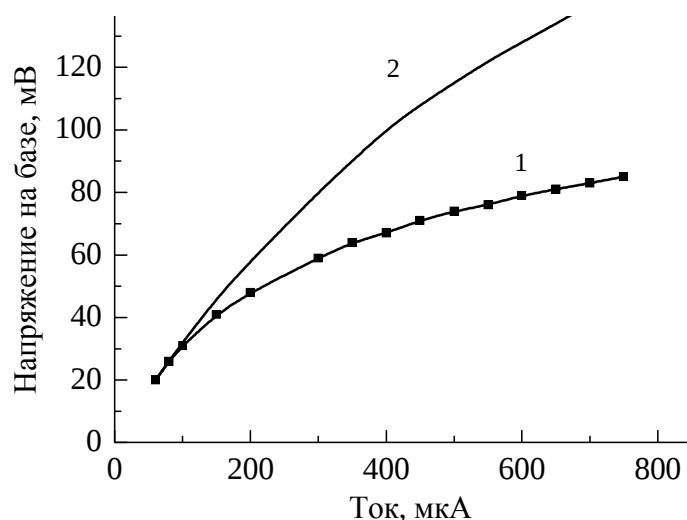


Рис.3. Зависимость падения напряжения на базе от тока через диод. 1 – эксперимент; 2 – расчет в предположении независимости времени жизни от уровня инжекции.

На рис.4 приведена экспериментальная зависимость времени жизни электронно-дырочной пары от уровня инжекции, полученная на основе результатов измерений из формулы (8). Видно, что время жизни резко уменьшается с ростом уровня инжекции и выходит на насыщение при относительно высоких уровнях инжекции. Такой ход зависимости вполне согласуется с теорией рекомбинации Шокли–Рида, согласно которой зависимость τ от $\Delta p(0)/n_0$ определяется удельным сопротивлением материала полупроводника [10]: при малых удельных сопротивлениях время жизни должно расти с уровнем инжекции; при больших удельных сопротивлениях оно уменьшается с уровнем инжекции; при некотором промежуточном удельном сопротивлении время жизни от уровня инжекции не должно зависеть. В нашем случае удельное сопротивление материала базы достаточно велико ($\sim 119 \text{ Омсм}$), что соответствует уменьшению времени жизни носителей с ростом уровня инжекции.

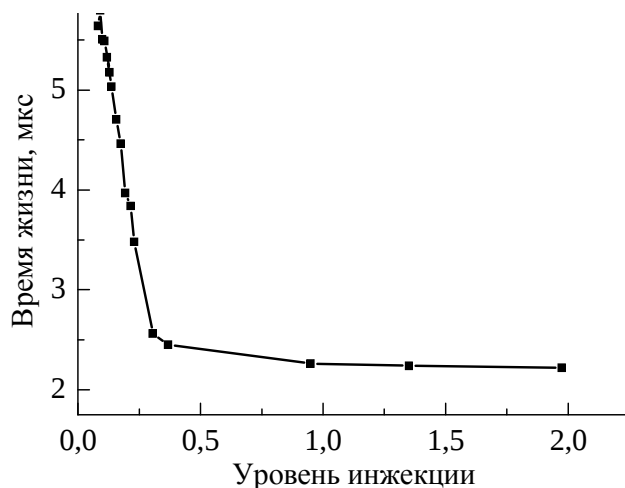


Рис.4. Зависимость времени жизни - от уровня инжекции $\Delta p(0)/n_0$ для сплавных диодов Д226Б, рассчитанная на основе экспериментальных данных по формуле (8).

4. Заключение

В данной работе показано, что на основе измерения одних лишь стационарных характеристик полупроводникового диода с p - n -переходом (ВАХ на постоянном токе и дифференциального сопротивления на низкой частоте) можно определить время жизни неравновесных носителей в базе диода при произвольных уровнях инжекции. Получена простая формула для вычисления времени жизни, пригодная при произвольных уровнях инжекции. Экспериментальная зависимость времени жизни от уровня инжекции согласуется с теорией рекомбинации Шокли–Рида, что можно считать обоснованием допущений, принятых при расчете времени жизни.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Ф.Ю.Солдатенков, В.Г.Данильченко, В.И.Корольков.** ФТП, **41**, 217 (2007).
2. **С.Н.Куап, С.Н.Ту.** J. Appl. Phys., **87**, 1836 (2000).
3. **S.Zh.Karazhanov.** J. Appl.Phys., **89**, 332 (2001).
4. **Н.Б.Радчук, А.Ю.Ушаков.** ПТЭ, №3, 112 (2003).
5. **Л.П. Павлов.** Методы измерения параметров полупроводниковых материалов. М., Высшая школа, 1987.
6. **А. Милнс.** Примеси с глубокими уровнями в полупроводниках. М., Мир, 1977.
7. **М.И.Иглицын, Ю.А.Концевой, А.И.Сидоров.** ЖТФ, **27**, 246 (1957).
8. **Ф.А.Хомчик.** Параметры полупроводниковых приборов. Минск, Наука и техника, 1969.
9. **С.Зи.** Физика полупроводниковых приборов. М., Мир, 1984.
10. **И.П.Степаненко.** Основы теории транзисторов и транзисторных схем. М., Энергоиздат, 1977.
11. **В.И.Стафеев.** ЖТФ, **28**, 1631 (1958).
12. **Н.С.Арамян.** Известия НАН Армении, Физика, 42, 51 (2007).

ԱՆՀԱՎԱՍԱՐԱԿՇՌՎԱԾ ԼԻՑԲԱՏԱՐՆԵՐԻ ԿՅԱՆՔԻ ՏԵՎՈՂՈՒԹՅՈՒՆԸ
p-n-ԱՆՅՈՒՄՈՎ ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴՉԱՅԻՆ ԴԻՈԴԻ ԲԱԶԱՅՈՒՄ
ԻՆԺԵԿՑԻԱՅԻ ԿԱՄԱՅԱԿԱՆ ՄԱԿԱՐԴԱԿԻ ԴԵՊՔՈՒՄ

Ն.Ս. ԱՐԱՄՅԱՆ

p-n-անցումով կիսահաղորդչային դիոդի բազայում անհավասարակշռված լիցքատարների էքսպոնենտային բախշման մոտավորությամբ ստացված է բանաձև՝ կյանքի տևողությունը հաշվելու համար, որը կիրառելի է ինժեկցիայի ցանկացած մակարդակի դեպքում: Կյանքի տևողությունը որոշվում է միայն ստացիոնար բնութագրերի չափումների հիման վրա (վոլտ-ամպերային բնութագիր և ցածր հաճախականության դիֆերենցիալ դիմադրություն): Կատարված են վոլտ-ամպերային բնութագրի և դիֆերենցիալ դիմադրության չափումներ Դ226Բ դիոդների համար, հավասարակշռված լիցքատարների խտությունը որոշելու համար չափված է արգելքային ունակությունը՝ կախված հետադարձ լարումից: Փորձնական տվյալների հիման վրա հաշվարկված անհավասարակշռված լիցքատարների կյանքի տևողության կախվածությունը ինժեկցիայի մակարդակից համապատասխանում է Շոքլի-Ռիդի վերամիավորման տեսությանը, ինչը կարելի է համարել հիմնավորում կյանքի տևողության հաշվարկում ընդունված մոտավորությունների համար:

LIFETIME OF NON-EQUILIBRIUM CHARGE CARRIERS
IN THE BASE OF *p-n*-JUNCTION SEMICONDUCTOR DIODE
AT ARBITRARY INJECTION LEVELS

N.S. ARAMYAN

In the approximation of exponential distribution of unequilibrium charge carriers in the base of semiconductor *p-n*-junction diode, a formula for lifetime calculation is obtained, which may be used at arbitrary injection levels. The lifetime is determined only by measurements of stationary characteristics of diode (voltage–current characteristic and low-frequency differential resistance). The voltage–current characteristic and differential resistance of D226B alloy diodes were measured. The dependence of barrier capacity on the inverse voltage was also measured, for determination of equilibrium carriers density. The unequilibrium charge carriers lifetime dependence on the injection level is in agreement with the Shockley–Read recombination theory.

УДК 537.611

ПОЛУЧЕНИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ФТАЛОЦИАНИНОВ ЦИНКА, ОДНОРОДНО ДОПИРОВАННЫХ ЩЕЛОЧНЫМИ МЕТАЛЛАМИ

А.С. МАНУКЯН, П.А. ВАРДЕРЕСЯН,
А.А. МИРЗАХАНИЯН, Э.Г. ШАРОЯН

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак

(Поступила в редакцию 28 февраля 2008 г.)

Разработана методика получения однородных образцов металл-фталочининов, допированных щелочными металлами. Исследованы поликристаллические образцы фталочинина цинка, допированные атомами натрия, калия и рубидия. Измерены температурные зависимости спектров ЭПР полученных образцов, исследованы их состав и структура. Показано, что их магнитные свойства сильно зависят не только от степени допирования и типа щелочного металла, но и от последующего размалывания и отжига.

1. Введение

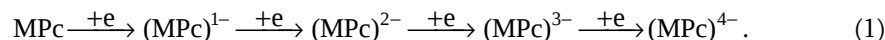
Как известно, электрические и магнитные свойства соединений в основном определяются двумя факторами: корреляцией электронов (отношением U/W , где U – энергия внутриузельного кулоновского отталкивания, известного как хаббардовское, W – ширина зоны) и степенью заполнения зоны проводимости δ . Достижения молекулярной электроники органических соединений связаны именно с возможностью контролировать их электронные свойства посредством изменения U/W и количество носителей n . Так была обнаружена металлическая проводимость в допированном полиацетиле и в ряде других молекулярных кристаллов, сверхпроводимость в фуллеренах, допированных щелочными металлами и т.д. [1,2].

Для синтеза высокопроводящих и магнитных органических материалов нами была разработана методика допирования твердотельных металл-фталочининов (MPc , где $Pc \equiv C_{32}H_{16}N_8$) донорами и акцепторами электронов (щелочные металлы и йод, соответственно) [3,4]. Был получен и исследован ряд соединений с переносом заряда на основе металл-фталочининов. Из этой группы выделяются металл-фталочинины, допированные щелочными металлами (A_xMPc , где $x > 1.5$), обладающие необычными магнитными свойствами [4-9]. Наиболее существенной особенностью магнитных соединений A_xMPc являются высокие значения их температуры Кюри T_c , которые иногда даже превышают комнатную температуру. Магнитные свойства этих соединений меняются в широких пределах. Они сильно зависят от степени допирования ($0 < x < 4$), от центрального металла ($M = Zn, Cu, Ni$,

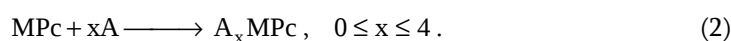
Co, Fe, Mn), а также от типа щелочного металла ($A = \text{Na, K, Rb, Cs}$).

Основной целью данной работы была разработка методики получения однородных образцов металл-фталоцианинов, допированных щелочными металлами, с заданной стехиометрией, а также исследование их магнитных свойств на примере ZnPc . Следует отметить, что молекула фталоцианина цинка диамагнитна и поэтому наблюдаемый нами парамагнетизм обусловлен допированием.

Допирование МРс щелочными металлами приводит к восстановлению молекул фталоцианина [10-13]. В растворе (обычно используется тетрагидрофуран THF) имеет место последовательное восстановление моно-, ди-, три- и тетра-анионов МРс, которое может быть представлено следующей схемой:

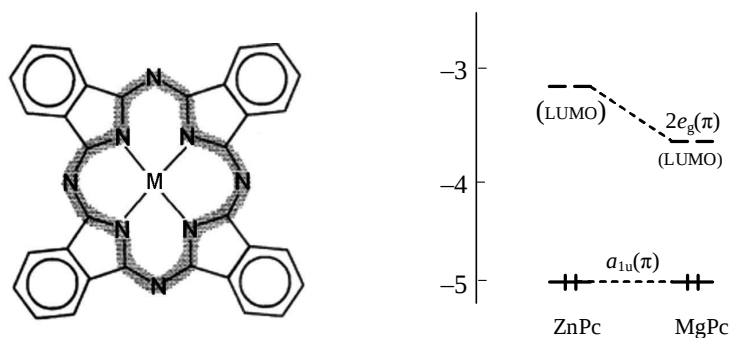


Допирование МРс в твердой фазе путем интеркалирования щелочными металлами можно описать аналогичной реакцией:



Однако соединения, полученные допированием монокристаллов, поликристаллов или пленок МРс посредством интеркалирования, значительно отличаются от соединений, полученных в растворе. При допировании МРс в растворе можно получить анионы $(\text{MPc})^{n-}$ только с целым зарядом $n = 1, 2, 3, 4$, в то время как при допировании твердотельных фталоцианинов возможно также получение молекул с дробными зарядами (например, с $n = 1.5, 2.5$ и т.д.). В этом случае появляется возможность синтезировать молекулы (анионы) различной валентности, а также фазы с различной стехиометрией; кроме того, возможно “расслоение” фаз, аналогичное твердым растворам манганитов [14,15].

Рис.1. Молекулярная структура МРс и фрагмент уровней



орбитальной энергии ZnPc и MgPc [16].

Допирование электронами приводит к заполнению дважды вырожденной π -молекулярной орбитали $2e_g$ молекулы фталоцианина цинка (см. рис.1) [16]. При $x < 0.1$ можно ожидать проявления эффекта Яна–Теллера от анионов $(\text{ZnPc})^{1-}$, а при больших

значениях x не исключена также возможность кооперативного эффекта Яна–Теллера. В частности, эффект Яна–Теллера анионов порфиринов $(\text{ZnP})^{1-}$ и $(\text{MgP})^{1-}$ в растворе был исследован методом ЭПР в работе [17].

2. Методика синтеза допированных образцов A_xMPc

Схема установки для синтеза образцов и температурные профили вдоль реакционной ампулы показаны на рис.2. Существенно, что МРс и А расположены при разных температурах, причем $T_{\text{МРс}} > T_{\text{А}}$. Реакция допирования может быть описана схемой $[\text{МРс}]_{\text{тв}} + x[\text{А}]_{\text{газ}} \rightarrow [\text{A}_x\text{МРс}]_{\text{тв}}$. Стехиометрия конечного материала (x) зависит в основном от температуры МРс и от давления насыщенных паров щелочного металла $p_{\text{sat}}(T_{\text{А}})$. Можно предположить, что меняя величину $p_{\text{sat}}(T_{\text{А}})$, можно варьировать значение x в образце $\text{A}_x\text{МРс}$, аналогично закону Генри [18].

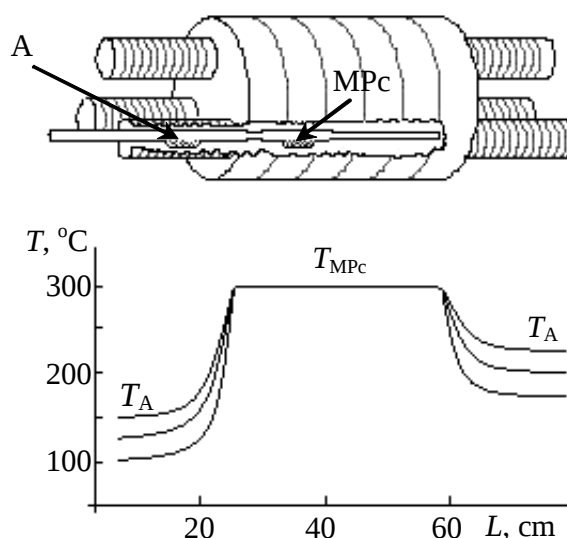


Рис.2. Схематическое представление реакционной установки и температурные профили вдоль нагревателей при синтезе $\text{A}_x\text{МРс}$. Для всех образцов $T_{\text{МРс}} = \text{const}$ и $T_{\text{А}} < T_{\text{МРс}}$.

Поликристаллические образцы ZnPc нами были допированы атомами натрия (Na), калия (K) и рубидия (Rb). В качестве экспресс-метода при магнитных исследованиях мы использовали спектры, снятые на стандартном ЭПР-спектрометре X-диапазона, которые наиболее информативны при определении степени восстановления образцов ZnPc .

3. ЭПР и структурные исследования

Было синтезировано более 40 образцов и были измерены отношения интегральных интенсивностей сигнала ЭПР при температуре жидкого азота (77 K) и при комнатной

температуре (300 К). Наиболее интересные образцы с сильным отклонением от закона Кюри были измерены также на спектрометре JEOL-JES-PE-3X в широком температурном интервале от 3.5 К до 300 К. Для всех образцов был проведен элементный анализ с помощью электронного дисперсионного спектрометра и были определены значения x . Структура ряда образцов была исследована с помощью сканирующего электронного микроскопа (СЭМ). Некоторые характерные результаты измерений представлены на рис.3–7.

3.1. Случай $\bar{x} < 0.1$; K_xZnPc и Rb_xZnPc

На рис.3 представлены спектры ЭПР образца K_xZnPc при разных температурах. Как уже отмечалось, при $x < 0.1$ можно ожидать проявления эффекта Яна–Теллера от анионов $(ZnPc)^{1-}$. Спектры на рис.3 показывают особенности эффекта Яна–Теллера в твердой матрице $ZnPc$. При $T = 77$ К наблюдается аксиально-симметричная линия с компонентами g -фактора $g_{||}(77\text{ К}) = 2.0008$ и $g_{\perp}(77\text{ К}) = 2.0044$. При комнатной температуре регистрируется почти изотропная линия с $g_{av}(300\text{ К}) = 2.0031$. Высокотемпературный g -фактор почти равен усредненному низкотемпературному g -фактору: $g_{av}(77\text{ К}) = (2g_{\perp} + g_{||})/3 = 2.0032$. Подобное поведение свидетельствует о проявлении статического и динамического эффектов Яна–Теллера в этих образцах.

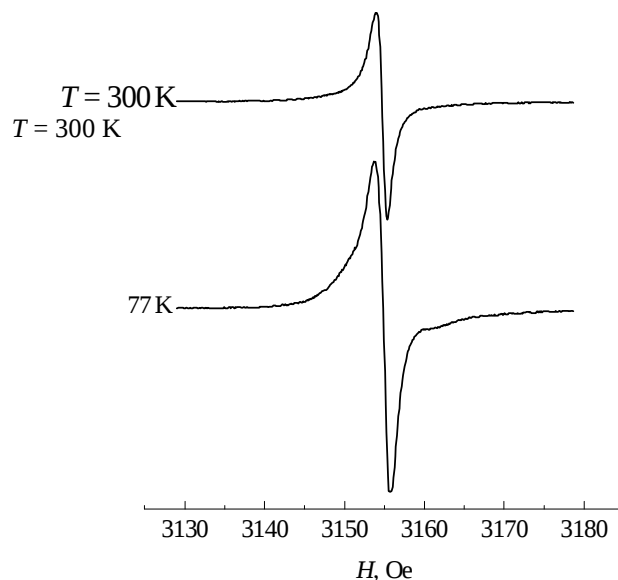


Рис.3. Спектры ЭПР K_xZnPc с $\bar{x} < 0.1$ при 77 К и 300 К.

Спектры ЭПР образцов Rb_xZnPc при разных температурах показаны на рис.4. В этом случае при комнатной температуре, очевидно, имеет место усреднение низкотемпературного спектра ЭПР. Температурная зависимость формы линии ЭПР представляет большой интерес и пока не совсем понятна. В интервале 66–100 К левая часть спектра более интенсивна, однако при 100–190 К форма линии меняется на противоположную. В интервале 200–300 К происходит усреднение g -факторов: $g_{\text{av}}(300 \text{ K}) = 2.0026$.

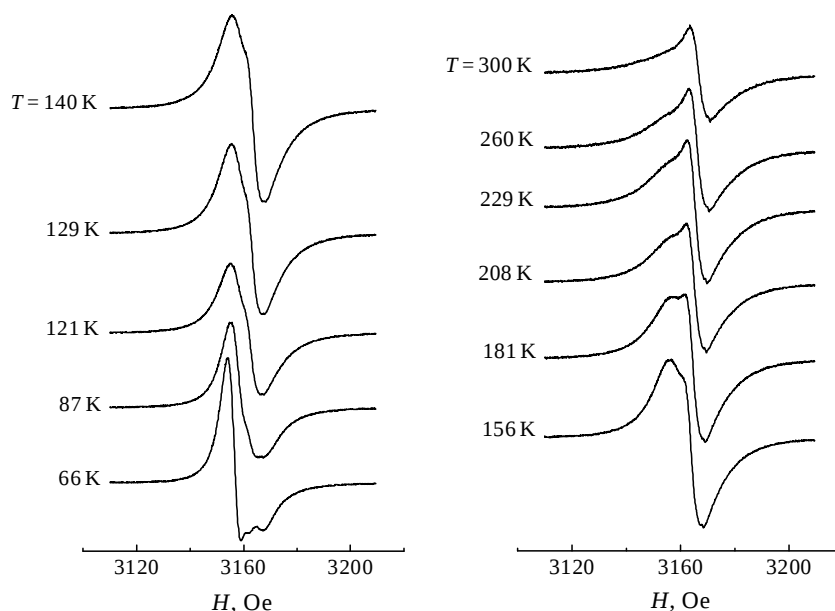


Рис.4. Спектры ЭПР Rb_xZnPc с $\bar{x} < 0.1$ в интервале 66–300 К.

3.2. Случай $\bar{x} \approx 0.5$; эффекты размывания и отжига

Многочисленные эксперименты, проведенные при $T_{\text{MPC}} = 350^\circ\text{C}$ и $T_{\text{A}} = 100$ (300°C показали, что при этих условиях получают образцы со значениями $\bar{x} \approx 0.5$. Очевидно, что сильное взаимодействие щелочного металла с молекулой фталоцианина приводит к тому, что закон Генри не имеет места для случая твердотельных MPC и что полученная стехиометрия x в конечном итоге определяется диффузионными процессами и потому сильно зависит от T_{MPC} и времени диффузии t . Вероятно, стехиометрия $\bar{x} \approx 0.5$ обусловлена энергетической выгодностью фазы $\text{A}_{0.5}\text{MPC}$. На рис.5 представлены спектры ЭПР нескольких образцов $\text{Na}_{0.5}\text{ZnPc}$ с одинаковым средним значением $\bar{x} \approx 0.5$. Различные формы спектров ЭПР, очевидно, обусловлены неоднородным распределением щелочного металла в образцах и анизотропией g -фактора. Аналогичные неодинаковые спектры были получены для образцов $\text{K}_{0.5}\text{ZnPc}$.

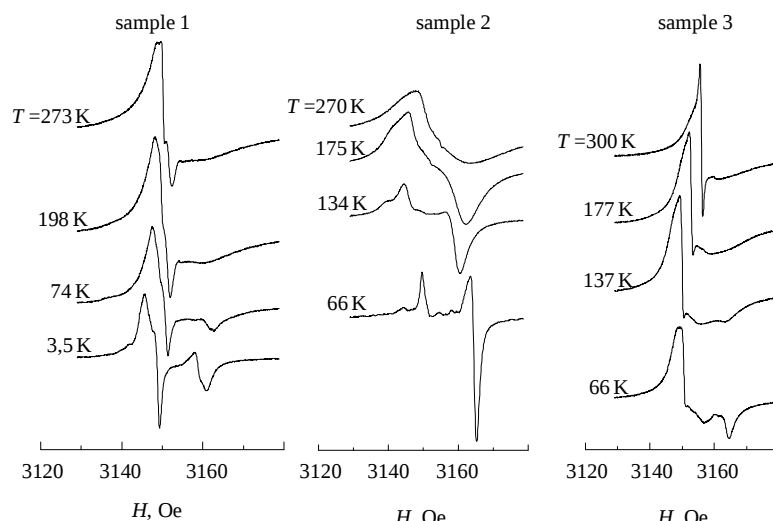


Рис.5. Температурные зависимости спектров ЭПР различных образцов $\text{Na}_{0.5}\text{ZnPc}$.

С целью получения более однородного распределения щелочного металла образцы размалывались (grinding) в агатовой ступке в атмосфере аргона. После размалывания и дальнейшего отжига были получены однородно-допированные образцы. Измерения значений x в различных участках образцов $\text{K}_{0.5}\text{ZnPc}$ с помощью электронного дисперсионного спектрометра показали, что среднее значение x равно 0.50 с отклонением ± 0.05 .

На рис.6 показаны СЭМ-изображения поликристаллических образцов $\text{K}_{0.5}\text{ZnPc}$ после синтеза и после размалывания и отжига. Спектры ЭПР образца $\text{K}_{0.5}\text{ZnPc}$ после размалывания и последующего отжига представлены на рис.7. ЭПР спектры симметричны и описываются изотропным g -фактором $g = 2.0055$. Таким образом, на основании СЭМ-изображений и спектров ЭПР можно утверждать, что тщательное размалывание и последующий отжиг приводят к получению однородно-допированных образцов A_xMPc .

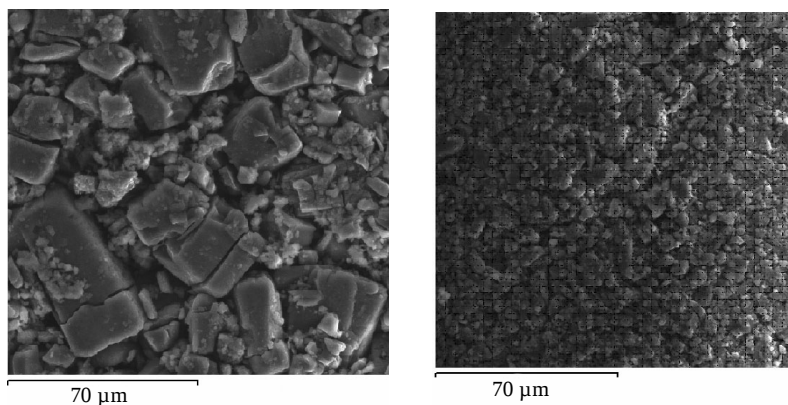


Рис.6. СЭМ-изображения поликристаллического образца $\text{K}_{0.5}\text{ZnPc}$ после синтеза (слева) и после размалывания и отжига (справа).

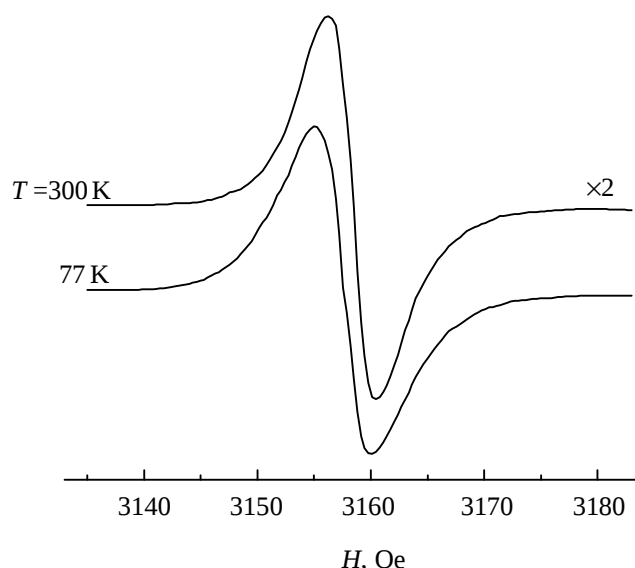


Рис.7. Спектры ЭПР поликристаллического образца $K_{0.5}ZnPc$ после размалывания и отжига.

Работа выполнена в рамках гранта ANSEF NO. PS-CONDMATEX-768 и научно-исследовательского проекта Республики Армения № 0048. Авторы благодарны Г.Р.Асатрянцу за содействие при измерениях низкотемпературных спектров ЭПР.

ЛИТЕРАТУРА

1. **C.K.Chiang, C.R.Fincher, Y.W.Park**, et al. Phys. Rev. Lett., **39**, 1098 (1977).
2. **L.Forro, L.Mihaly**. Rep. Prog. Phys., **64**, 649 (2001).
3. **Л.С.Григорян, М.В.Симонян, Э.Г.Шароян**. Авторское свидетельство СССР № 1120686 (1984).
4. **А.Р.Арутюнян, Л.С.Григорян, Э.Г.Шароян**. Авторские свидетельства СССР № 1385583, 1385584, 1385585, 1385586 (1987).
5. **A.R.Harutyunyan, L.S.Grigoryan, E.G.Sharoyan**. Materials Science, **14**, 121 (1988).
6. **E.G.Sharoyan, V.E.Sharoyan, F.M.Ovsyannikov**. J. Porphyrins and Phthalocyanines, **2**, 237 (1998).
7. **E.G.Sharoyan**. Abstracts of the first Int. Conf. on Porphyrins and Phthalocyanines, Dijon, France, 2000, p.170.
8. **E.G.Sharoyan**. Proc. of Int. Seminar ISTC, Yerevan, 2000, p.199.
9. **E.G.Sharoyan, A.S.Manukyan**. J. Porphyrins and Phthalocyanines, **9**, 146 (2005).
10. **R.Taube**. Z. Chem., **6**, 8 (1966).
11. **А.Н.Сидоров**. Оптика и спектроскопия, **40**, 492 (1976).
12. **А.Р.Арутюнян, Л.С.Григорян, Э.Г.Шароян**. Изв. АН Арм. ССР, **22**, 109 и 160 (1987).
13. **J.Mack, M.J.Stillman**. J. Porphyrins and Phthalocyanines, **5**, 67 (2001).
14. **Л.П.Горьков**. УФН, **168**, 665 (1998).
15. **Ю.А.Изюмов, Ю.Н.Скрябин**. УФН, **171**, 121 (2001).
16. **M.S.Liao, S.Scheiner**. J. Chem. Phys., **114**, 9780 (2001).
17. **J.Seth, D.Bocian**. J. Am. Chem. Soc., **116**, 143 (1994).

ԱԼԿԱԼԻԱԿԱՆ ՄԵՏԱՂՆԵՐՈՎ ԼԵԳԻՐՎԱԾ ՑԻՆԿԻ ՖՏԱԼՈՑԻԱՆԻՆՆԵՐԻ ՍՏԱՅՈՒՄԸ
ԵՎ ՄԱԳՆԵՏԱԿԱՆ ՀԱՏՎՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԸ

Ա.Ա. ՄԱՆՈՒԿՅԱՆ, Պ.Ա. ՎԱՐԴԵՐԵՍՅԱՆ, Ա.Ա. ՄԻՐԶԱԽԱՆՅԱՆ, Է.Գ. ՇԱՐՈՅԱՆ

Մշակված է ալկալիական մետաղներով լեգիրված ֆտալոցիանինների համասեռ նմուշների ստացման մեթոդ: Հետազոտված են նատրիումով, կալիումով և ռուբիդիումով լեգիրված ցինկի ֆտալոցիանինի բազմաբյուրեղային նմուշներ: Չափված են ստացված նմուշների ԷՊՌ սպեկտրների ջերմաստիճանային կախումները, ուսումնասիրված են դրանց բաղադրությունը և կառուցվածքը: Ցույց է տրված, որ նմուշների մագնիսական հատկությունները կախված են ինչպես լեգիրման աստիճանից, այնպես էլ դրանց հետագա մանրացումից և ջերմամշակումից:

PREPARATION AND MAGNETIC PROPERTIES OF ZINC PHTHALOCYANINES
HOMOGENEOUSLY DOPED WITH ALKALINE METALS

A.S. MANUKYAN, P.A. VARDERESYAN, A.A. MIRZAKHANYAN, E.G. SHAROYAN

A method of preparation of homogeneous samples of phthalocyanines doped with alkaline metals was developed. Polycrystalline samples of zinc phthalocyanines doped with sodium, potassium, and rubidium atoms were investigated. We measured the temperature dependences of ESR spectra of obtained samples and investigated their composition and structure. It is shown that their magnetic properties depend strongly on the degree of doping as well as on the subsequent grinding and annealing.

УДК 539.1

ВРЕМЕННОЕ РАЗРЕШЕНИЕ ДЕТЕКТОРА ФОРМЫ СГУСТКА С ТОНКОЙ ЭМИССИОННОЙ ПРОВОЛОКОЙ-МИШЕНЬЮ

С.В. ЖАМКОЧЯН

Ереванский физический институт им. А.И. Алиханяна, Армения

(Поступила в редакцию 26 марта 2008 г.)

Определено временное разрешение нового детектора продольных характеристик сгустка, основанного на СВЧ развертке вторичных электронов. Для точных расчетов по методу Монте-Карло разброса во временах пролета исследуемых электронов и определения размера регистрируемого электронного пятна разработан специальный код на основе программного обеспечения SIMION 8, где учтены распределение начальных энергий электронов, распределения углов их вылета, а также структура ускоряющего и фокусирующего электрических полей. Показано, что, используя в качестве эмиссионного катода-мишени тонкую проволоку, можно достичь фемтосекундного временного разрешения при умеренных напряжениях, приложенных к катоду и фокусирующим электродам.

1. Введение

Одной из наиболее важных характеристик пучка заряженных частиц является продольное распределение заряда в его сгустках. Этот параметр может быть использован как для изучения динамических свойств пучка, так и для настройки ускорителя. С помощью информации о продольном распределении заряда в сгустке можно вычислить энергетический спектр и продольный эмиттанс пучка. Однако, точное измерение формы сгустка является сложной технической проблемой и требует разработки специальной аппаратуры. Главными требованиями для такой аппаратуры являются высокое разрешение по времени, незначительное искажение первоначального пучка и быстрый отклик.

Продольная форма сгустка заряженных частиц может исследоваться при помощи детекторов, основанных на изучении образовавшихся в результате столкновения пучка с мишенью низкоэнергетических электронов вторичной эмиссии, отличительным свойством которых является слабая зависимость их свойств как от типа первоначальных частиц, так и от энергии пучка. Продольная структура сгустка в таких детекторах когерентно преобразуется во временную структуру потока вторичных электронов (ВЭ) и затем в пространственное распределение путем СВЧ развертки [1].

Детектор, основанный на анализе ВЭ, выбитых первоначальным пучком из проволоки-мишени, был разработан, построен и установлен на перезарядном линейном ускорителе Аргонн (Argonne Tandem Linear Accelerating System) [2]. В этом детекторе сигнал интегрируется в камере на приборе с зарядовой связью (ПЗС-камере) с периодом сбора данных 33 мс.

Настоящая работа посвящена симуляции по методу Монте-Карло работы детектора длины сгустка (BLD – Bunch Length Detector), основанного на разработанном недавно СВЧ отклоняющем устройстве круговой развертки частотой 500 МГц [3]. Использование этого дефлектора дает возможность циркулярно сканировать и регистрировать одиночные ВЭ, усиленные в микроканальных пластинах. Одиночные сигналы, генерируемые в этих пластинах, могут быть обработаны без интеграции при помощи доступной наносекундной электроники, что позволяет наблюдать высокочастотные колебания центра сгустка и его энергии.

Была проведена симуляция детекторов с эмиссионными мишенями в виде тонкой проволоки и плоского точечного катода. Показано, что предложенная система анализа вторичных электронов позволяет регистрировать одиночные электроны с временным разрешением порядка 100 фс.

2. Схематическая планировка предложенной аппаратуры

Схема предложенного детектора с эмиссионной мишенью в виде тонкой проволоки представлена на рис.1. Принцип действия детектора во многом схож с принципом действия устройств, предложенных в работах [2,4]. Исследуемый пучок налетает на проволоку-мишень (1) и выбивает низкоэнергетические ВЭ, которые затем ускоряются на интервале Z отрицательным напряжением, приложенным к проволоке. Пройдя через коллиматор

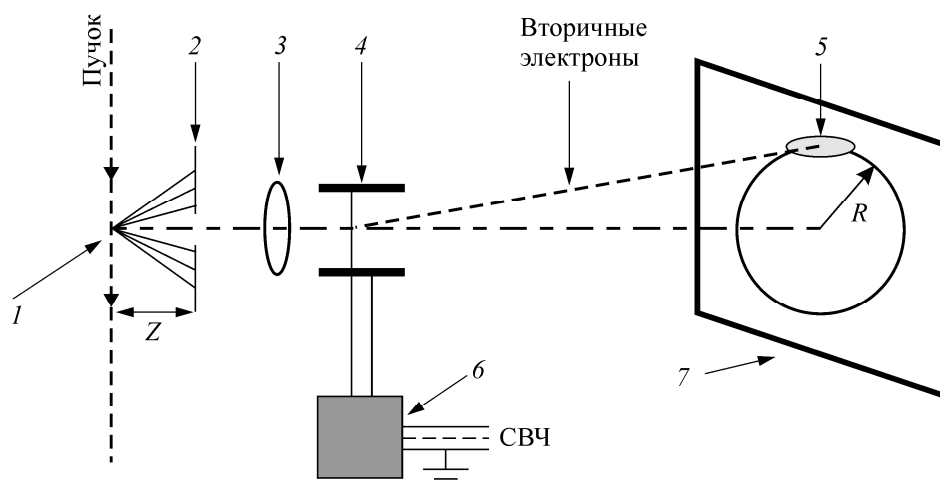


Рис.1. Схематическое изображение детектора с тонкой эмиссионной проволокой-мишенью. 1 – проволока-мишень, 2 – коллиматор, 3 – электростатическая линза, 4 – отклоняющие электроды, 5 – изображение ВЭ, 6 – СВЧ резонатор, 7 – детектор ВЭ.

(2), электроны фокусируются электростатической линзой (3) на экран (7) в дальнем конце установки, где расположен детектор ВЭ. На интервале между линзой (3) и экраном (7) электроны отклоняются СВЧ дефлектором круговой развертки, состоящим из электродов (4) и коаксиального СВЧ резонатора (6), осциллирующего с частотой, кратной частоте образования сгустков в ускорителе. Таким образом, на экране регистрируется ВЭ-изображение сгустка.

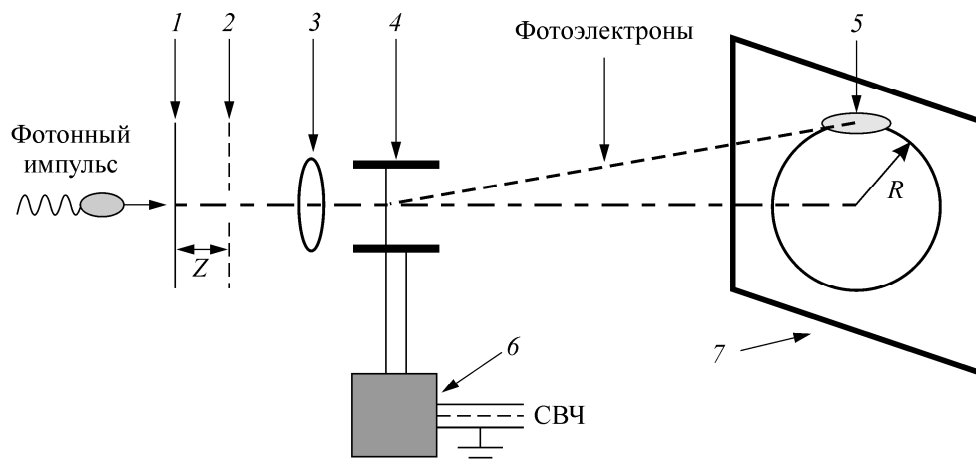


Рис.2. Схематическое изображение детектора с плоской точечной эмиссионной мишенью. 1 – плоская точечная мишень, 2 – прозрачный для электронов электрод, 3 – электростатическая линза, 4 – отклоняющие электроды, 5 – изображение ВЭ, 6 – ВЧ резонатор, 7 – детектор ВЭ.

Аналогичная схема была использована для детектора с мишенью в виде плоского точечного катода (рис.2). В этом случае первоначальный пучок или фотонный импульс сталкивается с плоской эмиссионной мишенью (1). Образовавшиеся электроны ускоряются на интервале Z прозрачным для них электродом (2) и, пройдя через системы фокусировки и СВЧ развертки, сканируются на экран и регистрируются.

3. Временное разрешение детектора

Временное разрешение детекторов рассмотренного типа определяется несколькими факторами [5,6].

а) Физическое временное разрешение вторичной электронной эмиссии, т.е. разброс времен выхода вторичных электронов. Нижний предел этой величины для металлов, согласно теоретическим оценкам, составляет примерно 10 фс [7].

б) Физическое временное разрешение электронной трубки обусловлено начальным распределением энергий и углов вылета ВЭ. Разброс времен пролета электронов на ускоряющем интервале между катодом-мишенью и коллиматором, определяющий в основном физическое разрешение трубки, может быть доведен, как это показано ниже, до десятков фс в случае с эмиссионным катодом-проволокой. Такое высокое разрешение достигается благодаря быстрому ускорению электронов в электрическом поле тонкой проволоки, потенциал φ которого относительно ее поверхности задается выражением $\varphi = -2\kappa \ln(r/R_0)$, где κ – линейная плотность заряда на проволоке, r – расстояние до поверхности проволоки, R_0 – радиус проволоки. Быстрый рост отрицательного потенциала φ проволоки на малых расстояниях от нее ясно виден на рис.3, где показана его форма в плоскости ZY (систему координат см. на рис.4). Для сравнения на рис.5 показан рост кинетической энергии

электрона для случаев движения с поверхности проволоки толщиной 20 мкм и плоского катода на интервале 1 см при ускоряющем напряжении –10 кВ.

в) Техническое временное разрешение электронной трубки определяется ее конструкцией и обусловлено разбросом во временах пролета электронов.

г) Техническое временное разрешение СВЧ отклоняющего устройства определяется как $\Delta\tau_d = d/v$, где d – размер пятна электронного пучка или пространственное разрешение электронного детектора (в случае, если пятно меньше разрешения детектора), а $v = 2\pi R/T$ – скорость развертки. Здесь T – период осцилляций СВЧ поля, R – радиус круговой развертки на позиционно-чувствительном детекторе. При $T = 2 \times 10^{-9}$ с ($f = 500$ МГц), $R = 2$ см и $d = 0.1$ мм $\Delta\tau_d = 2 \times 10^{-12}$ с.

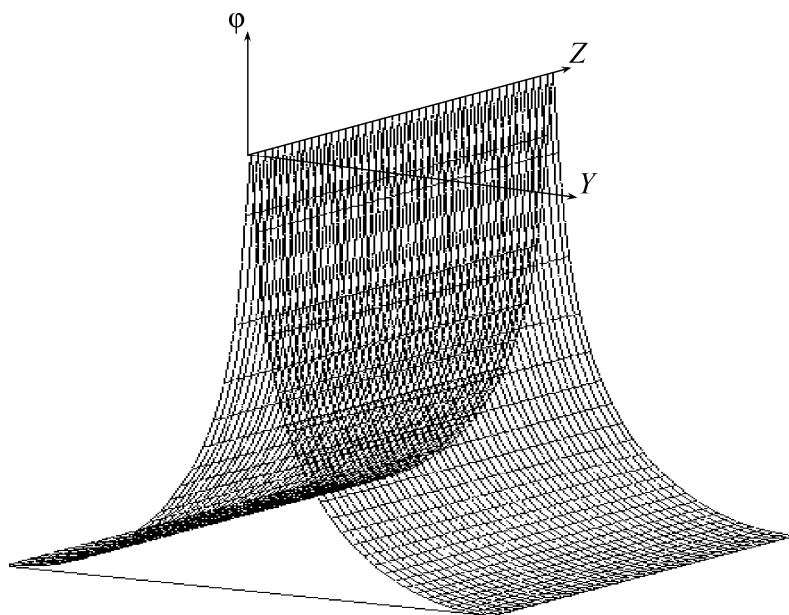


Рис.3. Форма потенциала ϕ тонкой проволоки в плоскости ZY .

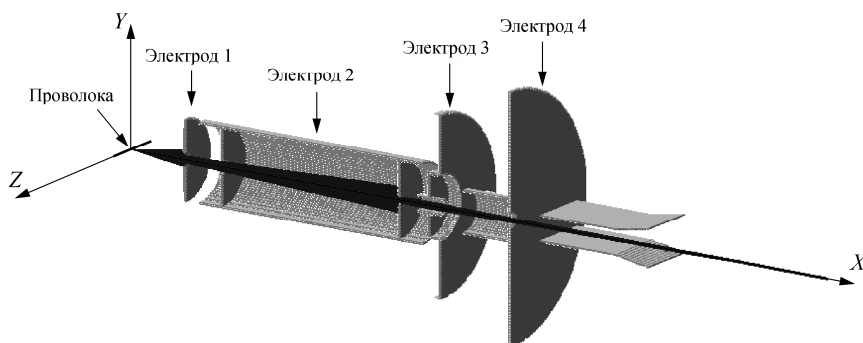


Рис.4. Симуляция детектора длины сгустка с эмиссионной проволокой-мишенью в SIMION 8.

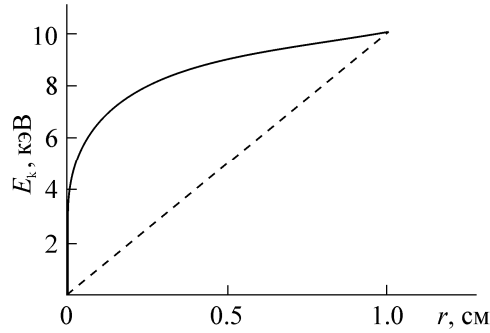


Рис.5. Рост кинетической энергии электрона при движении с поверхности проволоки толщиной 20 мкм (сплошная линия) и плоского катода (пунктирная линия).

В настоящей работе рассмотрены физическое и техническое разрешения электронной трубки, а также техническое разрешение СВЧ дефлектора.

4. Монте-Карло моделирование

Расчеты по методу Монте-Карло были проведены с помощью программного обеспечения SIMION 8 [8], которое позволяет вычислять значения электростатических потенциалов путем решения уравнения Лапласа для электрического поля

$$\nabla^2 \phi = \nabla E = \frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} = 0$$

с заданными граничными условиями.

Для оценки временного разрешения, а также с целью подбора оптимальных форм и напряжений для электродов электростатической линзы, было проведено моделирование работы предложенных детекторов длины сгустка. На рис.4 показана смоделированная фокусирующая система детектора с эмиссионным катодом в виде проволоки (аналогичная система предполагается и для детектора с плоским эмиссионным катодом-мишенью).

Начальные энергии вторичных электронов генерировались согласно экспоненциальному распределению

$$P(E) = \frac{E}{E_0} e^{-\frac{E}{E_0}},$$

где E – кинетическая энергия, а E_0 – наиболее вероятная энергия испущенного вторичного электрона. Такое энергетическое распределение примерно соответствует экспериментальному энергетическому спектру электронов, выбитых из алюминиевой фольги альфа-частицами с энергией 5.48 МэВ, если принять, что $E_0 = 1.8$ эВ [9]. Как показано в работе [10], энергетический спектр вторичных электронов практически не зависит от свойств эмиссионной поверхности, и приведенное выше распределение может быть использовано для генерации начальных энергий вторичных электронов с произвольной эмиссионной

поверхности. Для генерации значений полярного Φ и азимутального Θ углов вылета электронов было использовано изотропное распределение.

5. Результаты Монте-Карло моделирования

Временная дисперсия σ_{ph} между проволокой-мишенью и коллиматором может быть существенно уменьшена путем использования проволок меньшего радиуса. На рис.6 показаны рассчитанные значения σ_{ph} в зависимости от радиуса R_0 использованной проволоки для различных приложенных ускоряющих напряжений. Расчеты были проведены для расстояния между проволокой и коллиматором $Z = 1$ см и диаметра отверстия коллиматора $D = 1$ мм.

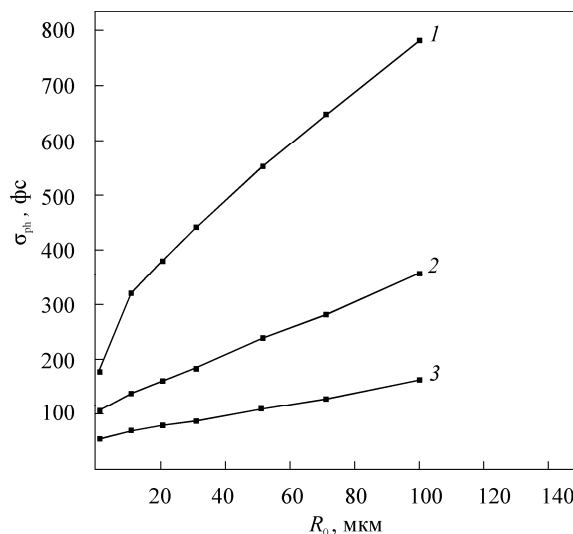


Рис.6. Зависимость дисперсии σ_{ph} времен пролета электронов между эмиссионной проволокой и коллиматором от радиуса проволоки R_0 . Кривые 1, 2 и 3 соответствуют приложенным напряжениям – 2.5 кВ, – 5 кВ и – 10 кВ, соответственно.

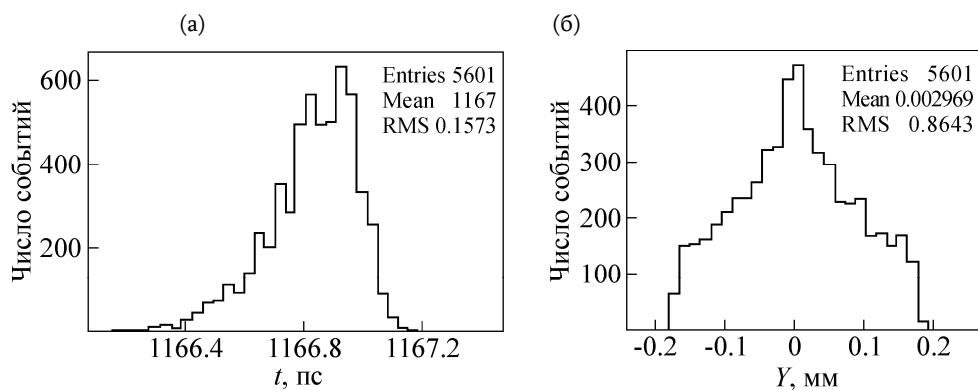


Рис.7. Гистограммы, полученные для конфигурации 2 в табл.1. а) распределение времен пролета вторичных электронов; б) распределение Y -отклонений вторичных электронов при выключенном СВЧ поле.

Как видно из рисунка, временного разрешения в десятки фемтосекунд можно достичь при умеренных приложенных напряжениях. Так, например, для радиуса 10 мкм и напряжения -10 кВ $\sigma_{ph} \sim 70 \text{ фс}$. Для сравнения, при использовании в аналогичных условиях плоского катода $\sigma_{ph} \sim 1 \text{ пс}$.

Распределение времен пролета электронов через всю систему и распределение, характеризующее размер электронного пятна (распределение Y -отклонений электронов при выключенном СВЧ поле), показаны на рис.7 ($R_0 = 12.5 \text{ мкм}$). Приложенные к электродам напряжения соответствуют конфигурации 2 в табл.1.

Таблица 1. Рассчитанные конфигурации фокусирующей системы с тонкой эмиссионной проволокой-мишенью.

Конфигурация (детектор с проволокой в качестве эмиссионной мишени)	Приложенные напряжения, В				
	Проволока	Электрод 1 (коллиматор)	Электрод 2	Электрод 3	Электрод 4
1	– 20 000	0	15 500	0	15 500
2	– 10 000	0	7 750	0	7 750
3	– 5 000	0	3800	0	3800
4	– 2 500	0	1900	0	1900

Следует отметить, что в случае детектора с проволокой-мишенью лишь около 0.5% от общего числа испущенных ВЭ достигает высокочастотного модулятора. Остальные электроны задерживаются коллиматором или сталкиваются со стенками электродов электростатической линзы. Использование же плоского катода позволяет регистрировать более 50% электронов. Такое свойство делает возможным применение детектора с плоским катодом-мишенью в системе регистрации тяжелых частиц. Как показывают расчеты для схемы с отклонением испущенных ВЭ в магнитном поле на 90° , временное разрешение такой системы можно довести до 15–20 фс, при ускоряющем напряжении 5 кВ.

Таблица 2. Рассчитанные конфигурации фокусирующей системы с плоским точечным катодом-мишенью.

Конфигурация (детектор с плоским точеч- ным эмис- сионным катодом)	Приложенные напряжения, В				
	Катод	Электрод 1 (прозрачный для элек- тронов)	Электрод 1	Электрод 2	Электрод 3
1	- 20 000	0	18 000	0	18 000
2	- 10 000	0	9 000	0	9 000
3	- 5 000	0	4 500	0	4 500
4	- 2 500	0	2 250	0	2 250

Временные разрешения различных конфигураций приложенных к электродам напряжений для детектора с мишенью-проволокой (табл.1; $R_0 = 12.5$ мкм, $Z = 1$ см) и детектора с плоским катодом (табл.2; $Z = 2$ мм) показаны на рис.8 и 9, соответственно.

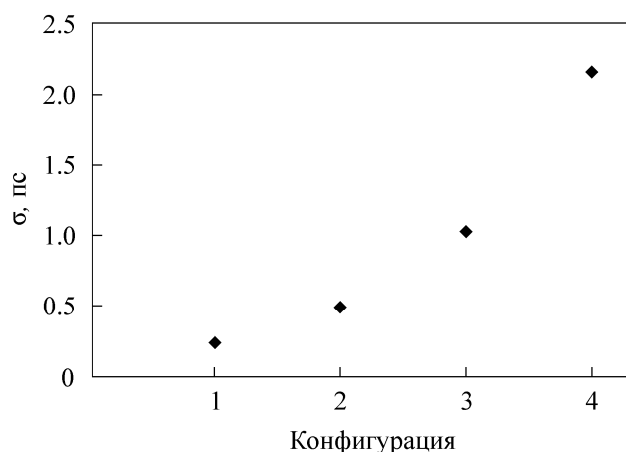


Рис.8. Временное разрешение детектора с эмиссионной проволокой в зависимости от конфигурации приложенных к электродам напряжений.

Полученные значения σ для случая плоского катода согласуются с данными, полученными другими авторами [11]. Как видно из приведенных таблиц, временное разрешение существенно выше при использовании тонкой проволоки. Для предложенных конфигураций временные дисперсии составляют сотни фемтосекунд. Таким образом, полное разрешение детектора определяется, в основном, точностью фокусировки электростатической линзы. Для рассмотренных случаев эта величина меньше 100 мкм (в переводе на время 1.6 пс при частоте сканирования $f = 500$ МГц и радиусе окружности на экране $R = 2$ см). Точность системы может быть улучшена путем повышения частоты сканирования. Так, при частоте 10 ГГц техническая ошибка также сводится к величине порядка 100 фс.

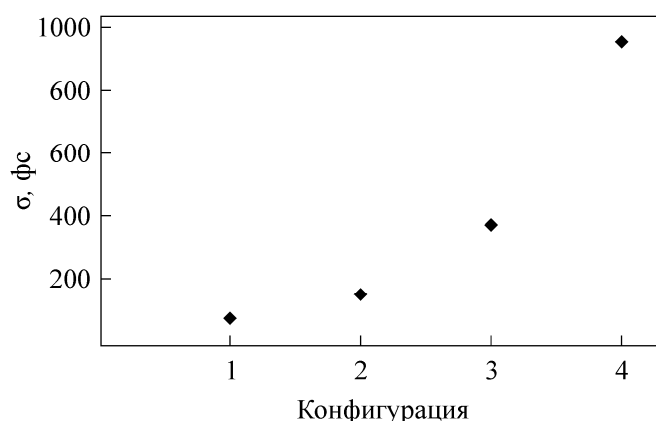


Рис.9. Временное разрешение детектора с плоским катодом в зависимости от конфигурации приложенных к электродам напряжений.

6. Заключение

Показано, что предложенные схемы детектора продольной длины сгустка позволяют достичь временного разрешения в сотни фс за счет быстрого ускорения ВЭ в электрическом поле тонкой проволоки и оптимального подбора форм и приложенных напряжений для электродов фокусирующей системы. Устройство способно измерять формы сгустков непрерывных пучков благодаря возможности регистрации и анализа одиночных вторичных электронов [4]. Подобная техника может использоваться для регистрации запаздывающих продуктов деления с субнаносекундными временами жизни, а также в экспериментах с пучками тяжелых ионов как компактный и точный инструмент для измерения времени пролета [12].

Данная работа была поддержана программой NFSAT, проект № 11/06.

ЛИТЕРАТУРА

1. **A.V.Feschchenko**. Proc. of the Particle Accelerator Conference, Chicago, 2001, p.517.
2. **N.E.Vinogradov** et al. Nucl. Instr. and Meth., **A526**, 206 (2004).
3. **A.Margaryan, R.Carlini, R.Ent**, et al. Nucl. Instr. and Meth., **A566**, 321 (2006).
4. **A.Margaryan** et al. Proc. of Int. Conf. Brilliant Light in Life and Material Sciences, Springer, p.455 (2007).
5. **E.K.Zavoisky, S.D.Feschchenko**. Appl. Optics, **4**, 1155 (1965).
6. **R.Kalibjian** et al. Rev. Sci. Instrum., **45**, 776 (1974).
7. **И.М.Бронштейн, Б.С.Фрайман**. Вторичная электронная эмиссия. М., Наука, 1969.
8. Scientific Instrument Services, Inc., <http://www.simion.com>.
9. **V.M.Agranovich, D.K.Dankevich**, et al. Sov. Phys. JETP, **30**, 220 (1979).
10. **E.J. Sternglass**. Phys. Rev., **108**, 1 (1957).
11. **W.Sibbett, H.Niu, R.Baggs**. Rev. Sci. Instrum., **53**, 758 (1982)
12. **R.Pardo et al.** RIA Diagnostics Development at Argonne. <http://www.oro.doe.gov/riaseb/wrkshop2003/papers/p-2-4-4.pdf>.

ԹԱՆՁՐՈՒԿԻ ՁԵՎԻ ԲԱՐԱԿ ԼԱՐՈՎ ԷՄԻՍԻՈՆ ԴԵՏԵԿՏՈՐԻ
ԺԱՄԱՆԱԿԱՅԻՆ ԼՈՒԾՈՂԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆԸ

Ս.Վ. ԺԱՄԿՈՉՅԱՆ

Որոշված է գերբարձր հաճախականությունների վրա հիմնված նոր, թանձրուկի երկարության դետեկտորի ժամանակային լուծողականությունը: Մոնտե-Կարլո մեթոդով հետազոտվող էլեկտրոնների թռիչքի ժամանակների և էլեկտրոնային պատկերի չափսերի ճշգրիտ հաշվարկների համար ստեղծվել է SIMION 8 ծրագրի վրա հիմնված հատուկ կոդ, որտեղ հաշվի են առնվել էլեկտրոնների նախնական էներգիաների բաշխումը, նրանց դուրս գալու անկյունների բաշխումը, ինչպես նաև արագացնող և ֆոկուսացնող էլեկտրական դաշտերի ռեալ կառուցվածքը: Ցույց է տրված, որ, օգտագործելով որպես էմիսիոն թիրախ բարակ լար, հնարավոր է ստանալ ֆեմտո-վայրկյանային ժամանակային լուծողականություն, առանց մեծ լարումներ կիրառելու:

TIME RESOLUTION OF THE BUNCH SHAPE DETECTOR
WITH A THIN-WIRE EMISSION TARGET

S.V. ZHAMKOCHYAN

The time resolution of a new bunch length detector based on radio frequency (RF) scanning of the produced secondary electrons is calculated. A dedicated Monte-Carlo code by means of SIMION software is developed for accurate simulation of spread in the investigated secondary electrons transit times and image width. In calculations the initial energy distribution of electrons and the actual structure of accelerating and focusing electric fields were considered. It is shown that by using a thin-wire emission target a femtosecond time precision could be achieved using moderate applied voltages.

УДК 539.1

ВРЕМЕННОЕ РАЗРЕШЕНИЕ ДЕТЕКТОРА ФОРМЫ СГУСТКА С ТОНКОЙ ЭМИССИОННОЙ ПРОВОЛОКОЙ-МИШЕНЬЮ

С.В. ЖАМКОЧЯН

Ереванский физический институт им. А.И. Алиханяна, Армения

(Поступила в редакцию 26 марта 2008 г.)

Определено временное разрешение нового детектора продольных характеристик сгустка, основанного на СВЧ развертке вторичных электронов. Для точных расчетов по методу Монте-Карло разброса во временах пролета исследуемых электронов и определения размера регистрируемого электронного пятна разработан специальный код на основе программного обеспечения SIMION 8, где учтены распределение начальных энергий электронов, распределения углов их вылета, а также структура ускоряющего и фокусирующего электрических полей. Показано, что, используя в качестве эмиссионного катода-мишени тонкую проволоку, можно достичь фемтосекундного временного разрешения при умеренных напряжениях, приложенных к катоду и фокусирующим электродам.

1. Введение

Одной из наиболее важных характеристик пучка заряженных частиц является продольное распределение заряда в его сгустках. Этот параметр может быть использован как для изучения динамических свойств пучка, так и для настройки ускорителя. С помощью информации о продольном распределении заряда в сгустке можно вычислить энергетический спектр и продольный эмиттанс пучка. Однако, точное измерение формы сгустка является сложной технической проблемой и требует разработки специальной аппаратуры. Главными требованиями для такой аппаратуры являются высокое разрешение по времени, незначительное искажение первоначального пучка и быстрый отклик.

Продольная форма сгустка заряженных частиц может исследоваться при помощи детекторов, основанных на изучении образовавшихся в результате столкновения пучка с мишенью низкоэнергетических электронов вторичной эмиссии, отличительным свойством которых является слабая зависимость их свойств как от типа первоначальных частиц, так и от энергии пучка. Продольная структура сгустка в таких детекторах когерентно преобразуется во временную структуру потока вторичных электронов (ВЭ) и затем в пространственное распределение путем СВЧ развертки [1].

Детектор, основанный на анализе ВЭ, выбитых первоначальным пучком из проволоки-мишени, был разработан, построен и установлен на перезарядном линейном ускорителе Аргонн (Argonne Tandem Linear Accelerating System) [2]. В этом детекторе сигнал интегрируется в камере на приборе с зарядовой связью (ПЗС-камере) с периодом сбора данных 33 мс.

Настоящая работа посвящена симуляции по методу Монте-Карло работы детектора длины сгустка (BLD – Bunch Length Detector), основанного на разработанном недавно СВЧ отклоняющем устройстве круговой развертки частотой 500 МГц [3]. Использование этого дефлектора дает возможность циркулярно сканировать и регистрировать одиночные ВЭ, усиленные в микроканальных пластинах. Одиночные сигналы, генерируемые в этих пластинах, могут быть обработаны без интеграции при помощи доступной наносекундной электроники, что позволяет наблюдать высокочастотные колебания центра сгустка и его энергии.

Была проведена симуляция детекторов с эмиссионными мишенями в виде тонкой проволоки и плоского точечного катода. Показано, что предложенная система анализа вторичных электронов позволяет регистрировать одиночные электроны с временным разрешением порядка 100 фс.

2. Схематическая планировка предложенной аппаратуры

Схема предложенного детектора с эмиссионной мишенью в виде тонкой проволоки представлена на рис.1. Принцип действия детектора во многом схож с принципом действия устройств, предложенных в работах [2,4]. Исследуемый пучок налетает на проволоку-мишень (1) и выбивает низкоэнергетические ВЭ, которые затем ускоряются на интервале Z отрицательным напряжением, приложенным к проволоке. Пройдя через коллиматор

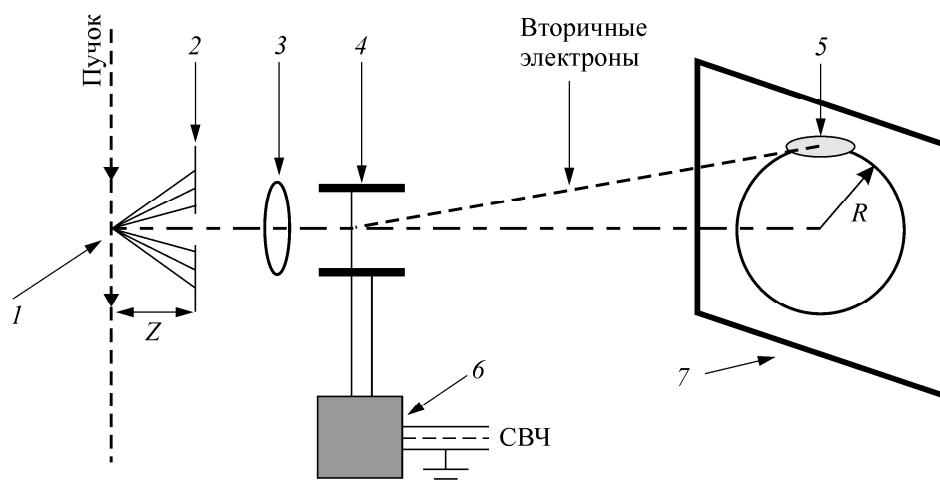


Рис.1. Схематическое изображение детектора с тонкой эмиссионной проволокой-мишенью. 1 – проволока-мишень, 2 – коллиматор, 3 – электростатическая линза, 4 – отклоняющие электроды, 5 – изображение ВЭ, 6 – СВЧ резонатор, 7 – детектор ВЭ.

(2), электроны фокусируются электростатической линзой (3) на экран (7) в дальнем конце установки, где расположен детектор ВЭ. На интервале между линзой (3) и экраном (7) электроны отклоняются СВЧ дефлектором круговой развертки, состоящим из электродов (4) и коаксиального СВЧ резонатора (6), осциллирующего с частотой, кратной частоте образования сгустков в ускорителе. Таким образом, на экране регистрируется ВЭ-изображение сгустка.

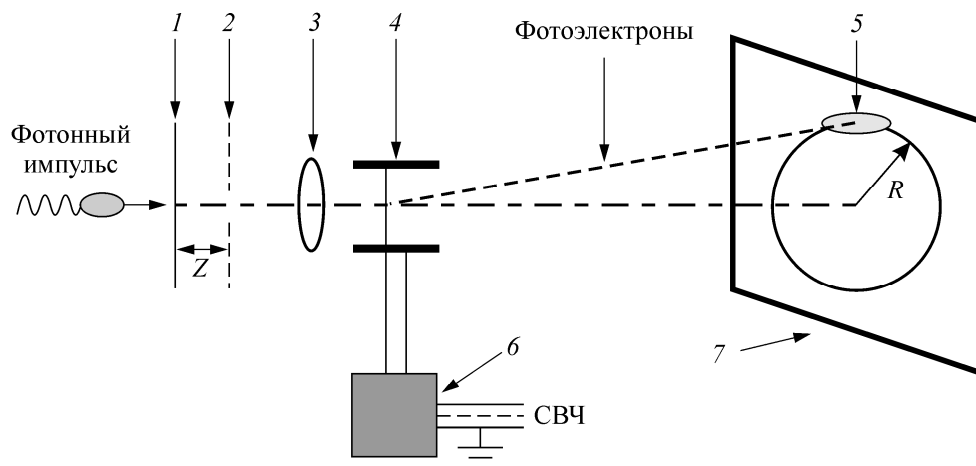


Рис.2. Схематическое изображение детектора с плоской точечной эмиссионной мишенью. 1 – плоская точечная мишень, 2 – прозрачный для электронов электрод, 3 – электростатическая линза, 4 – отклоняющие электроды, 5 – изображение ВЭ, 6 – ВЧ резонатор, 7 – детектор ВЭ.

Аналогичная схема была использована для детектора с мишенью в виде плоского точечного катода (рис.2). В этом случае первоначальный пучок или фотонный импульс сталкивается с плоской эмиссионной мишенью (1). Образовавшиеся электроны ускоряются на интервале Z прозрачным для них электродом (2) и, пройдя через системы фокусировки и СВЧ развертки, сканируются на экран и регистрируются.

3. Временное разрешение детектора

Временное разрешение детекторов рассмотренного типа определяется несколькими факторами [5,6].

а) Физическое временное разрешение вторичной электронной эмиссии, т.е. разброс времен выхода вторичных электронов. Нижний предел этой величины для металлов, согласно теоретическим оценкам, составляет примерно 10 фс [7].

б) Физическое временное разрешение электронной трубки обусловлено начальным распределением энергий и углов вылета ВЭ. Разброс времен пролета электронов на ускоряющем интервале между катодом-мишенью и коллиматором, определяющий в основном физическое разрешение трубки, может быть доведен, как это показано ниже, до десятков фс в случае с эмиссионным катодом-проволокой. Такое высокое разрешение достигается благодаря быстрому ускорению электронов в электрическом поле тонкой проволоки, потенциал φ которого относительно ее поверхности задается выражением $\varphi = -2\kappa \ln(r/R_0)$, где κ – линейная плотность заряда на проволоке, r – расстояние до поверхности проволоки, R_0 – радиус проволоки. Быстрый рост отрицательного потенциала φ проволоки на малых расстояниях от нее ясно виден на рис.3, где показана его форма в плоскости ZY (систему координат см. на рис.4). Для сравнения на рис.5 показан рост кинетической энергии

электрона для случаев движения с поверхности проволоки толщиной 20 мкм и плоского катода на интервале 1 см при ускоряющем напряжении –10 кВ.

в) Техническое временное разрешение электронной трубки определяется ее конструкцией и обусловлено разбросом во временах пролета электронов.

г) Техническое временное разрешение СВЧ отклоняющего устройства определяется как $\Delta\tau_d = d/v$, где d – размер пятна электронного пучка или пространственное разрешение электронного детектора (в случае, если пятно меньше разрешения детектора), а $v = 2\pi R/T$ – скорость развертки. Здесь T – период осцилляций СВЧ поля, R – радиус круговой развертки на позиционно-чувствительном детекторе. При $T = 2 \times 10^{-9}$ с ($f = 500$ МГц), $R = 2$ см и $d = 0.1$ мм $\Delta\tau_d = 2 \times 10^{-12}$ с.

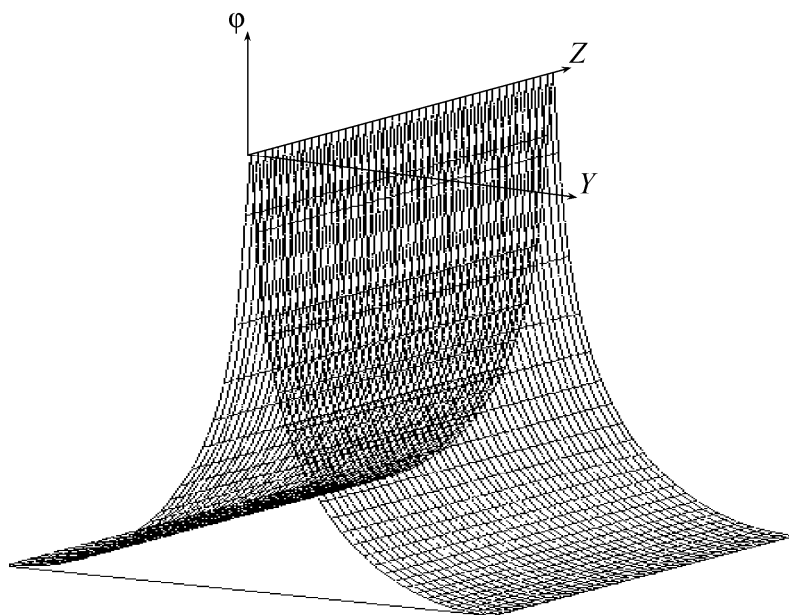


Рис.3. Форма потенциала ϕ тонкой проволоки в плоскости ZY .

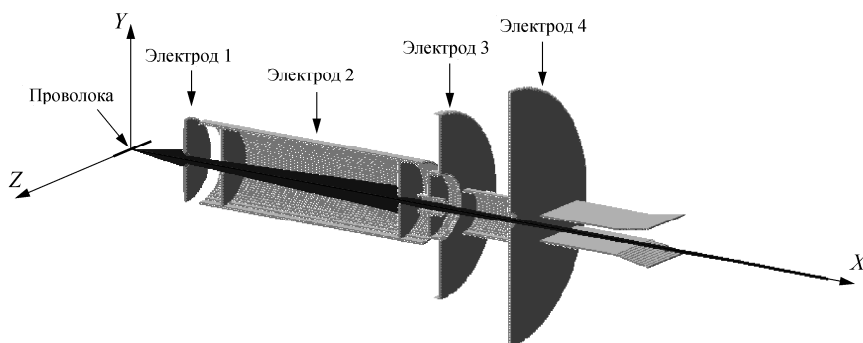


Рис.4. Симуляция детектора длины сгустка с эмиссионной проволокой-мишенью в SIMION 8.

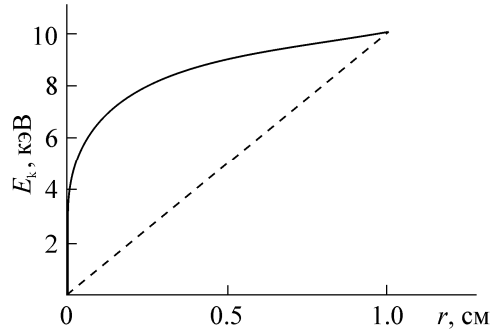


Рис.5. Рост кинетической энергии электрона при движении с поверхности проволоки толщиной 20 мкм (сплошная линия) и плоского катода (пунктирная линия).

В настоящей работе рассмотрены физическое и техническое разрешения электронной трубки, а также техническое разрешение СВЧ дефлектора.

4. Монте-Карло моделирование

Расчеты по методу Монте-Карло были проведены с помощью программного обеспечения SIMION 8 [8], которое позволяет вычислять значения электростатических потенциалов путем решения уравнения Лапласа для электрического поля

$$\nabla^2 \phi = \nabla E = \frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} = 0$$

с заданными граничными условиями.

Для оценки временного разрешения, а также с целью подбора оптимальных форм и напряжений для электродов электростатической линзы, было проведено моделирование работы предложенных детекторов длины сгустка. На рис.4 показана смоделированная фокусирующая система детектора с эмиссионным катодом в виде проволоки (аналогичная система предполагается и для детектора с плоским эмиссионным катодом-мишенью).

Начальные энергии вторичных электронов генерировались согласно экспоненциальному распределению

$$P(E) = \frac{E}{E_0} e^{-\frac{E}{E_0}},$$

где E – кинетическая энергия, а E_0 – наиболее вероятная энергия испущенного вторичного электрона. Такое энергетическое распределение примерно соответствует экспериментальному энергетическому спектру электронов, выбитых из алюминиевой фольги альфа-частицами с энергией 5.48 МэВ, если принять, что $E_0 = 1.8$ эВ [9]. Как показано в работе [10], энергетический спектр вторичных электронов практически не зависит от свойств эмиссионной поверхности, и приведенное выше распределение может быть использовано для генерации начальных энергий вторичных электронов с произвольной эмиссионной

поверхности. Для генерации значений полярного Φ и азимутального Θ углов вылета электронов было использовано изотропное распределение.

5. Результаты Монте-Карло моделирования

Временная дисперсия σ_{ph} между проволокой-мишенью и коллиматором может быть существенно уменьшена путем использования проволок меньшего радиуса. На рис.6 показаны рассчитанные значения σ_{ph} в зависимости от радиуса R_0 использованной проволоки для различных приложенных ускоряющих напряжений. Расчеты были проведены для расстояния между проволокой и коллиматором $Z = 1$ см и диаметра отверстия коллиматора $D = 1$ мм.

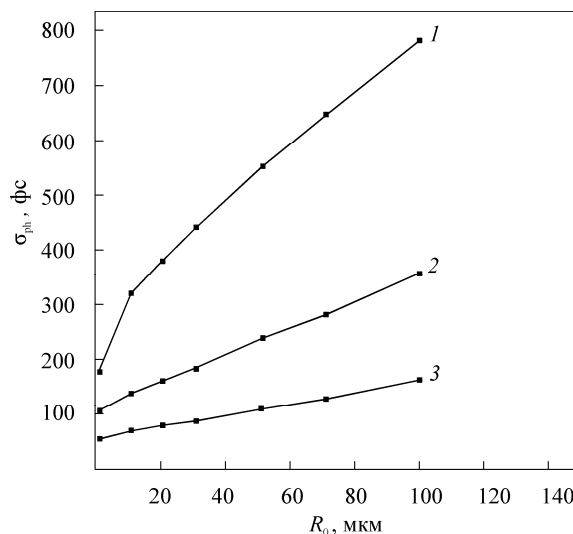


Рис.6. Зависимость дисперсии σ_{ph} времен пролета электронов между эмиссионной проволокой и коллиматором от радиуса проволоки R_0 . Кривые 1, 2 и 3 соответствуют приложенным напряжениям – 2.5 кВ, – 5 кВ и – 10 кВ, соответственно.

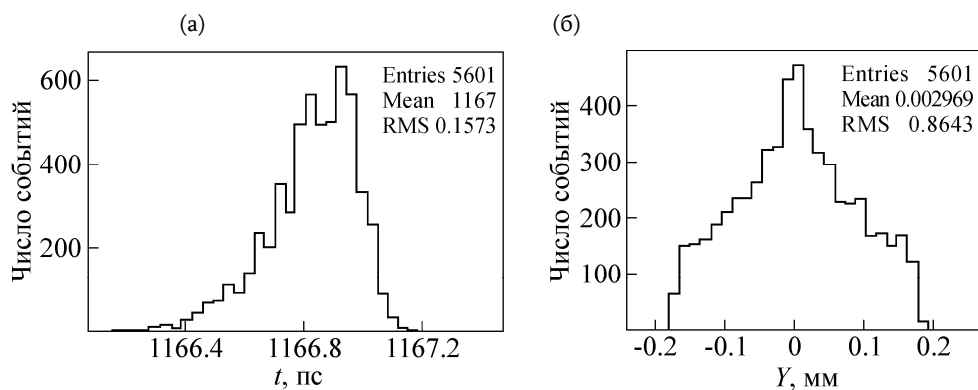


Рис.7. Гистограммы, полученные для конфигурации 2 в табл.1. а) распределение времен пролета вторичных электронов; б) распределение Y -отклонений вторичных электронов при выключенном СВЧ поле.

Как видно из рисунка, временного разрешения в десятки фемтосекунд можно достичь при умеренных приложенных напряжениях. Так, например, для радиуса 10 мкм и напряжения -10 кВ $\sigma_{ph} \sim 70 \text{ фс}$. Для сравнения, при использовании в аналогичных условиях плоского катода $\sigma_{ph} \sim 1 \text{ пс}$.

Распределение времен пролета электронов через всю систему и распределение, характеризующее размер электронного пятна (распределение Y -отклонений электронов при выключенном СВЧ поле), показаны на рис.7 ($R_0 = 12.5 \text{ мкм}$). Приложенные к электродам напряжения соответствуют конфигурации 2 в табл.1.

Таблица 1. Рассчитанные конфигурации фокусирующей системы с тонкой эмиссионной проволокой-мишенью.

Конфигурация (детектор с проволокой в качестве эмиссионной мишени)	Приложенные напряжения, В				
	Проволока	Электрод 1 (коллиматор)	Электрод 2	Электрод 3	Электрод 4
1	– 20 000	0	15 500	0	15 500
2	– 10 000	0	7 750	0	7 750
3	– 5 000	0	3800	0	3800
4	– 2 500	0	1900	0	1900

Следует отметить, что в случае детектора с проволокой-мишенью лишь около 0.5% от общего числа испущенных ВЭ достигает высокочастотного модулятора. Остальные электроны задерживаются коллиматором или сталкиваются со стенками электродов электростатической линзы. Использование же плоского катода позволяет регистрировать более 50% электронов. Такое свойство делает возможным применение детектора с плоским катодом-мишенью в системе регистрации тяжелых частиц. Как показывают расчеты для схемы с отклонением испущенных ВЭ в магнитном поле на 90° , временное разрешение такой системы можно довести до 15–20 фс, при ускоряющем напряжении 5 кВ.

Таблица 2. Рассчитанные конфигурации фокусирующей системы с плоским точечным катодом-мишенью.

Конфигурация (детектор с плоским точеч- ным эмис- сионным катодом)	Приложенные напряжения, В				
	Катод	Электрод 1 (прозрачный для элек- тронов)	Электрод 1	Электрод 2	Электрод 3
1	- 20 000	0	18 000	0	18 000
2	- 10 000	0	9 000	0	9 000
3	- 5 000	0	4 500	0	4 500
4	- 2 500	0	2 250	0	2 250

Временные разрешения различных конфигураций приложенных к электродам напряжений для детектора с мишенью-проволокой (табл.1; $R_0 = 12.5$ мкм, $Z = 1$ см) и детектора с плоским катодом (табл.2; $Z = 2$ мм) показаны на рис.8 и 9, соответственно.

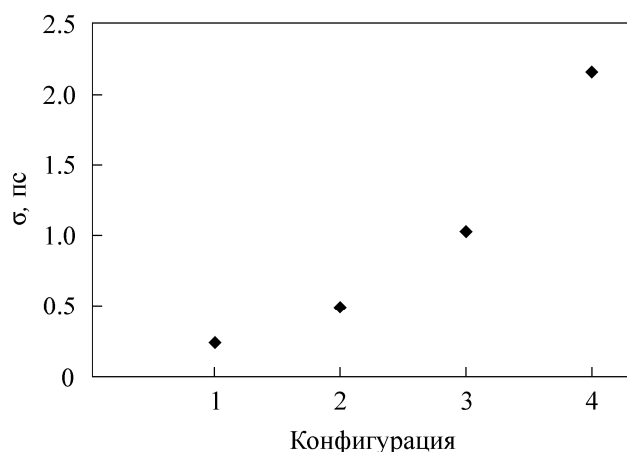


Рис.8. Временное разрешение детектора с эмиссионной проволокой в зависимости от конфигурации приложенных к электродам напряжений.

Полученные значения σ для случая плоского катода согласуются с данными, полученными другими авторами [11]. Как видно из приведенных таблиц, временное разрешение существенно выше при использовании тонкой проволоки. Для предложенных конфигураций временные дисперсии составляют сотни фемтосекунд. Таким образом, полное разрешение детектора определяется, в основном, точностью фокусировки электростатической линзы. Для рассмотренных случаев эта величина меньше 100 мкм (в переводе на время 1.6 пс при частоте сканирования $f = 500$ МГц и радиусе окружности на экране $R = 2$ см). Точность системы может быть улучшена путем повышения частоты сканирования. Так, при частоте 10 ГГц техническая ошибка также сводится к величине порядка 100 фс.

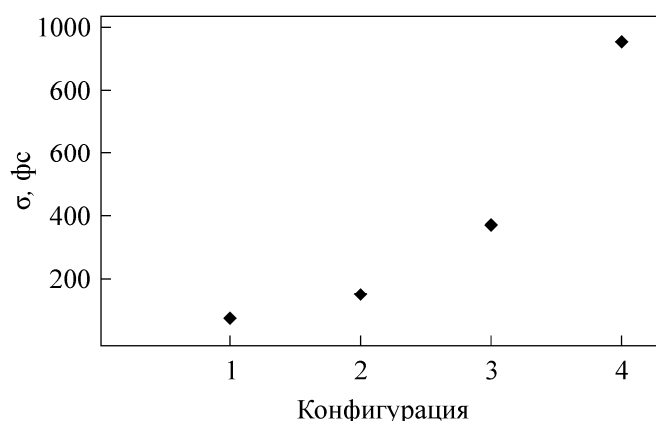


Рис.9. Временное разрешение детектора с плоским катодом в зависимости от конфигурации приложенных к электродам напряжений.

6. Заключение

Показано, что предложенные схемы детектора продольной длины сгустка позволяют достичь временного разрешения в сотни фс за счет быстрого ускорения ВЭ в электрическом поле тонкой проволоки и оптимального подбора форм и приложенных напряжений для электродов фокусирующей системы. Устройство способно измерять формы сгустков непрерывных пучков благодаря возможности регистрации и анализа одиночных вторичных электронов [4]. Подобная техника может использоваться для регистрации запаздывающих продуктов деления с субнаносекундными временами жизни, а также в экспериментах с пучками тяжелых ионов как компактный и точный инструмент для измерения времени пролета [12].

Данная работа была поддержана программой NFSAT, проект № 11/06.

ЛИТЕРАТУРА

1. **A.V.Feschchenko**. Proc. of the Particle Accelerator Conference, Chicago, 2001, p.517.
2. **N.E.Vinogradov** et al. Nucl. Instr. and Meth., **A526**, 206 (2004).
3. **A.Margaryan, R.Carlini, R.Ent**, et al. Nucl. Instr. and Meth., **A566**, 321 (2006).
4. **A.Margaryan** et al. Proc. of Int. Conf. Brilliant Light in Life and Material Sciences, Springer, p.455 (2007).
5. **E.K.Zavoisky, S.D.Feschchenko**. Appl. Optics, **4**, 1155 (1965).
6. **R.Kalibjian** et al. Rev. Sci. Instrum., **45**, 776 (1974).
7. **И.М.Бронштейн, Б.С.Фрайман**. Вторичная электронная эмиссия. М., Наука, 1969.
8. Scientific Instrument Services, Inc., <http://www.simion.com>.
9. **V.M.Agranovich, D.K.Dankevich**, et al. Sov. Phys. JETP, **30**, 220 (1979).
10. **E.J. Sternglass**. Phys. Rev., **108**, 1 (1957).
11. **W.Sibbett, H.Niu, R.Baggs**. Rev. Sci. Instrum., **53**, 758 (1982)
12. **R.Pardo et al.** RIA Diagnostics Development at Argonne. <http://www.oro.doe.gov/riaseb/wrkshop2003/papers/p-2-4-4.pdf>.

ԹԱՆՁՐՈՒԿԻ ՁԵՎԻ ԲԱՐԱԿ ԼԱՐՈՎ ԷՄԻՍԻՈՆ ԴԵՏԵԿՏՈՐԻ
ԺԱՄԱՆԱԿԱՅԻՆ ԼՈՒԾՈՂԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆԸ

Ս.Վ. ԺԱՄԿՈՉՅԱՆ

Որոշված է գերբարձր հաճախականությունների վրա հիմնված նոր, թանձրուկի երկարության դետեկտորի ժամանակային լուծողականությունը: Մոնտե-Կարլո մեթոդով հետազոտվող էլեկտրոնների թռիչքի ժամանակների և էլեկտրոնային պատկերի չափսերի ճշգրիտ հաշվարկների համար ստեղծվել է SIMION 8 ծրագրի վրա հիմնված հատուկ կոդ, որտեղ հաշվի են առնվել էլեկտրոնների նախնական էներգիաների բաշխումը, նրանց դուրս գալու անկյունների բաշխումը, ինչպես նաև արագացնող և ֆոկուսացնող էլեկտրական դաշտերի ռեալ կառուցվածքը: Ցույց է տրված, որ, օգտագործելով որպես էմիսիոն թիրախ բարակ լար, հնարավոր է ստանալ ֆեմտո-վայրկյանային ժամանակային լուծողականություն, առանց մեծ լարումներ կիրառելու:

TIME RESOLUTION OF THE BUNCH SHAPE DETECTOR
WITH A THIN-WIRE EMISSION TARGET

S.V. ZHAMKOCHYAN

The time resolution of a new bunch length detector based on radio frequency (RF) scanning of the produced secondary electrons is calculated. A dedicated Monte-Carlo code by means of SIMION software is developed for accurate simulation of spread in the investigated secondary electrons transit times and image width. In calculations the initial energy distribution of electrons and the actual structure of accelerating and focusing electric fields were considered. It is shown that by using a thin-wire emission target a femtosecond time precision could be achieved using moderate applied voltages.

УДК 541.64

ОБОБЩЕННАЯ МОДЕЛЬ ПОЛИПЕПТИДНОЙ ЦЕПИ ПРИ НАЛИЧИИ ОГРАНИЧЕНИЯ НА ДЛИНУ СПИРАЛЬНОГО УЧАСТКА

Ш.А. ТОНОЯН, Г.Н. АЙРАПЕТЯН, А.В. ЦАРУКЯН,
Е.Ш. МАМАСАХЛИСОВ, В.Ф. МОРОЗОВ

Ереванский государственный университет, Армения

(Поступила в редакцию 8 февраля 2008 г.)

Предложена модель с гамильтонианом, состоящим из двух слагаемых, соответствующих гамильтонианам Обобщенной Модели Полипептидной Цепи (ОМПЦ), с различными масштабами взаимодействия. Рассмотрен случай, когда крупномасштабное взаимодействие соответствует отталкиванию, в то время, когда мелкомасштабное взаимодействие соответствует притяжению, что моделирует плавление системы в условиях компактной упаковки (глобуляризованный полипептид или ДНК в капсиде). В рамках трансфер-матричного подхода вычислены корреляционная длина ξ и степень спиральности θ . Показано, что температурное поведение корреляционной длины определяется комплексным значением второго собственного значения трансфер-матрицы. В этом режиме система демонстрирует новый тип корреляций, когда ширина интервала перехода не может быть мерой кооперативности системы.

1. Введение

Ранее [1,2] было исследовано совместное влияние взаимодействия двух масштабов в рамках модели ОМПЦ [1-8]. В частности, было исследовано совместное влияние водородного связывания и стэкинга на переход спираль-клубок в ДНК [2]. Стэкинг рассматривался как взаимодействие ближайших соседей, а комплементарное водородное связывание рассматривалось, как взаимодействие большего масштаба.

В [1] было показано, что, когда мелкомасштабные взаимодействия имеют характер отталкивания, то это приводит к росту кооперативности системы по сравнению с базовой моделью. Если же мелкомасштабные взаимодействия имеют характер притяжения, то кооперативность падает. Это утверждение получено как на основании анализа поведения корреляционной длины, так и из температурной зависимости степени спиральности.

Однако, в приведенных выше работах рассматривалось влияние взаимодействия меньшего масштаба на переход спираль-клубок, описываемый крупномасштабной моделью. В настоящей работе исследуется влияние крупномасштабных ограничений на переход спираль-клубок, описываемый мелкомасштабной моделью. Такое исследование совместного сосуществования взаимодействий различных масштабов продиктовано следующей проблемой. Биополимеры *in vivo* часто бывают компактизованы в структуры различной природы.

Например, ДНК в бактериофагах и вирусах упакована в капсид, ограничивающий размеры клубка. Известно также, что природные белки находятся в глобулярном состоянии, возникающем из-за отталкивания между гидрофобными повторяющимися единицами и водой. Это отталкивание, в частности, можно моделировать как сжатие в потенциальной яме или упаковку в сферической полости [9]. Таким образом, учет влияния полости на переход спираль–клубок приводит к возникновению взаимодействия масштаба, отличного от масштаба, приводящего к спиральному состоянию, что представляет большой интерес.

В данной статье исследуется ОМПЦ с двумя масштабами взаимодействия. На основе этой модели в обобщенном виде будет исследовано влияние сферической полости на переход спираль–клубок, как ограничение на предельную длину регулярной спиральной последовательности.

2. Двухмасштабная ОМПЦ

В работе [1] уже была введена двухмасштабная ОМПЦ. Приведем ее основные характеристики. Рассматривается модель с гамильтонианом вида

$$-\beta H = \sum_i^N J_1 \prod_{k=\Delta_1-1}^0 \delta(\gamma_{i-k}, 1) + J_2 \prod_{k=\Delta_2-1}^0 \delta(\gamma_{i-k}, 1) = \sum_i^N (J_1 \delta_i^{(\Delta_1)} + J_2 \delta_i^{(\Delta_2)}), \quad (1)$$

где $\beta = T^{-1}$, N – число повторяющихся единиц, $J_1 = U_1/T$ и $J_2 = U_2/T$ – приведенные энергии (U_1 и U_2 – энергии взаимодействия масштаба Δ_1 и Δ_2). $\delta(\gamma_i, 1)$, – символ Кронекера, γ_i – спиновая переменная, описывающая конформацию одной повторяющейся единицы и принимающая значения от 1 до Q , причем номером 1 отмечена конформация, приводящая к спиральному состоянию. Таким образом, Q определяет число конформаций одной повторяющейся единицы. Гамильтониан (1) моделирует тот факт, что приведенная энергия связывания J_1 или J_2 выделяется лишь в том случае, когда Δ_1 или Δ_2 подряд повторяющихся единиц находятся в конформации 1. Не ограничивая общности, предположим, что $\Delta_1 > \Delta_2$. Трансфер-матрица $\hat{G}$ для модели с гамильтонианом (1) имеет вид

$$\hat{G} = \begin{pmatrix} W & R & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & R & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & R & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & Q-1 \\ 1 & 1 & 1 & \dots & 1 & 1 & \dots & 1 & Q-1 \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где размер матрицы равен Δ_1 , а подматрицы с единичными значениями в первой верхней псевдодиагонали – Δ_2 ; $W = \exp(J_1 + J_2)$ и $R = \exp(J_2)$. Структура трансфер-матрицы такова, что при $J_2 = 0$ (т.е. $R = 1$) и при $J_1 = 0$ (т.е. $W = R$) гамильтониан (1) становится одномасштабным с $\Delta = \Delta_1$ или $\Delta = \Delta_2$.

Введем параметр α как долю энергии мелкомасштабного взаимодействия относительно полной энергии обоих масштабов взаимодействия:

$$\alpha = \frac{J_2}{J_1 + J_2} = \frac{J_2}{J}. \quad (3)$$

Гамильтониан (1) с учетом (3) может быть записан как

$$-\beta H = J \sum_{i=1}^N ((1-\alpha)\delta_i^{(\Delta_1)} + \alpha\delta_i^{(\Delta_2)}). \quad (4)$$

В зависимости от значения и знака α гамильтониан может описывать разные свойства модели. Случай $0 < \alpha < 1$ соответствует притягивающему, а $\alpha < 0$ отталкивающему воздействию масштаба Δ_2 на базовую модель с взаимодействием масштаба Δ_1 . Эти случаи были уже рассмотрены в работах [1,2].

Если $\alpha > 1$, то гамильтониан описывает наложение ограничений на длину спирального участка взаимодействия масштаба Δ_1 на переход спираль-клубок, описываемый взаимодействием масштаба Δ_2 . Последний случай, как было указано выше, может соответствовать пространственным ограничениям, наложенным на ДНК в вирусном капсиде.

3. Вычисляемые параметры

Как обычно, в термодинамическом пределе и гомополимерном приближении статсумма может быть представлена как [10,11]

$$Z = \text{Tr} \hat{G}^N \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \lambda_1^N. \quad (5)$$

Для двухмасштабной модели введем степени упорядоченности для обоих масштабов взаимодействия следующим образом:

$$\theta_k = \langle \delta_i^{(\Delta_k)} \rangle = \frac{1}{N} \frac{\partial \ln Z}{\partial J_k} = \frac{\partial \ln \lambda_1}{\partial J_k}, \quad (6)$$

где $k=1,2$ (т.е. θ_1 для (1-масштабного взаимодействия и θ_2 для (2-масштабного). Это выражение получается из определения статсуммы для гамильтониана (1):

$$Z = \sum_{\{\gamma\}} e^{-\beta H} = \sum_{\{\gamma\}} e^{J_1 \sum_{i=1}^N \delta_i^{(\Delta_1)} + J_2 \sum_{i=1}^N \delta_i^{(\Delta_2)}}. \quad (7)$$

Продифференцировав Z по J_1 или J_2 и разделив на NZ , получим среднюю долю связей масштаба Δ_1 и Δ_2 .

Как всегда, корреляции флуктуаций содержат информацию о переходе в системе [1-8]. Пространственную парную корреляционную функцию можно написать как

$$g_{kl}(r) = \langle \delta_i^{(\Delta_k)} \delta_{i+r}^{(\Delta_l)} \rangle - \langle \delta_i^{(\Delta_k)} \rangle \langle \delta_i^{(\Delta_l)} \rangle, \quad (8)$$

где $k=1,2$.

В трансфер-матричном представлении

$$g_{kl}(r) = \text{Tr}(\hat{G}'_k \hat{G}^{r-1} \hat{G}'_l \hat{G}^{N-r-1}) - \text{Tr}(\hat{G}'_k \hat{G}^{N-1}) \text{Tr}(\hat{G}'_l \hat{G}^{N-1}), \quad (9)$$

где $\hat{G}'_m = \partial G / \partial J_m$. После диагонализации трансфер-матриц корреляционная функция примет вид

$$g_{kl} = \sum_{n=2}^{\Delta_1} C_n^{kl} \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1} \right)^r, \quad (10)$$

где λ – собственное значение трансфер-матрицы $\hat{G}$ [12]. Отметим, что только коэффициенты C_n^{kl} зависят от выбора типа коррелятора. При достаточно больших r это выражение упрощается:

$$g_{kl}(r) = C_2^{kl} \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^r = C_2^{kl} \exp\left(-\frac{r}{\xi}\right), \quad (11)$$

где

$$\xi = [\ln(\lambda_1 / \lambda_2)]^{-1} \quad (12)$$

есть корреляционная длина. Из (12) становится ясно, что корреляционная длина – это лишь масштаб, описывающий корреляции между конформациями, который не зависит от конкретного выбора рассматриваемых конформаций, в противоположность степени упорядоченности, которая различна для двух масштабов взаимодействий (см. (8)).

4. Обсуждение результатов

Как и ожидалось, поведение модели для случая $\alpha > 1$, который рассматривается в данной статье, качественно отличается от случая $\alpha < 1$, рассмотренного в [1].

Повторим еще раз, что для этих значений α крупномасштабное взаимодействие с масштабом Δ_1 имеет характер отталкивания, а мелкомасштабное взаимодействие с масштабом Δ_2 – характер притяжения. Этот случай описывает ограничения большого масштаба Δ_1 на спиральные участки, возникающие из-за взаимодействий малого масштаба Δ_2 . В этом случае температурная зависимость корреляционной длины ξ более сложная и может быть разделена на три области значений α , как показано на рис.1–3. На рисунках наряду с корреляционной длиной приведены зависимости степени спиральности θ от приведенной температуры. Следует отметить, что различия между θ_1 и θ_2 при исследуемых наборах параметров несущественны, поэтому приводится лишь одна из них. Верхняя кривая на рис.1 соответствует базовой модели с одним масштабом взаимодействия Δ_2 (т.е. $\alpha = 1$). Для значений α , слегка превышающих единицу, наблюдается та же закономерность, что и при $\alpha < 1$ [1], то есть максимальная корреляционная длина убывает с увеличением α . В этом интервале, как и в случае $\alpha < 1$, произведение $\xi_{\max}$ и ΔT все еще остается не зависящим от α , т.е. информации по корреляционной длине и по степени спиральности дублируют друг друга. При дальнейшем увеличении α , как это показано на рис.2, возникает второй максимум. Левый максимум растет с ростом α , тогда как правый уменьшается. Как показано на рис.3, после этого значения α левый максимум резко растет и смещается по направлению низких температур.

При дальнейшем увеличении α максимум корреляционной длины исчезает и она становится монотонно убывающей функцией температуры. Интересно, что степень спиральности теряет монотонность и уже не является сигмоидальной кривой в том же интервале значений α (см. рис.3b).

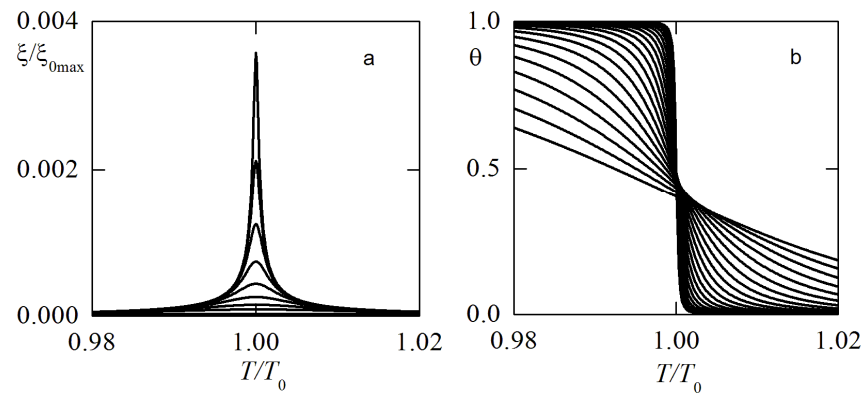


Рис.1. а) Зависимость корреляционной длины от температуры для значений параметров $\Delta_1=18$, $\Delta_2=11$, $Q=5$ и $\alpha \in [1,1.9]$. Данные представлены в приведенных единицах $\xi/\xi_{0\max}$ и T/T_0 , где $\xi_{0\max}$ – максимальная корреляционная длина базовой модели ($\alpha=1$), T_0 – температура перехода базовой модели. б) зависимость степени спиральности от температуры для того же набора параметров и в тех же единицах.

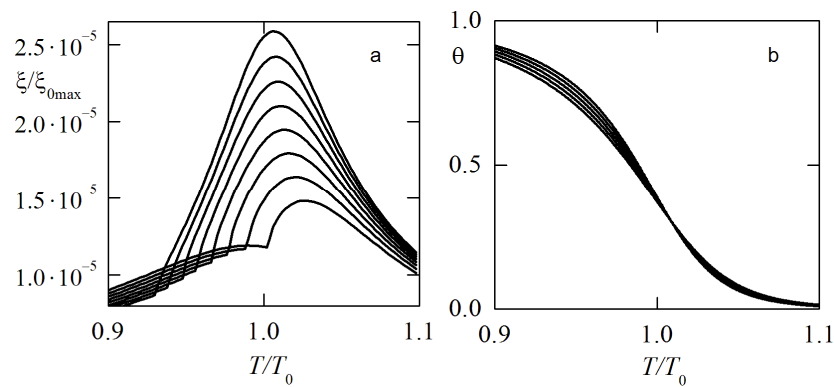


Рис.2. а) Зависимость корреляционной длины от температуры для значений параметров $\Delta_1=18$, $\Delta_2=11$, $Q=5$ и $\alpha \in [1.9,1.95]$. Данные представлены в приведенных единицах $\xi/\xi_{0\max}$ и T/T_0 . б) Зависимость степени спиральности от температуры для того же набора параметров и в тех же единицах.

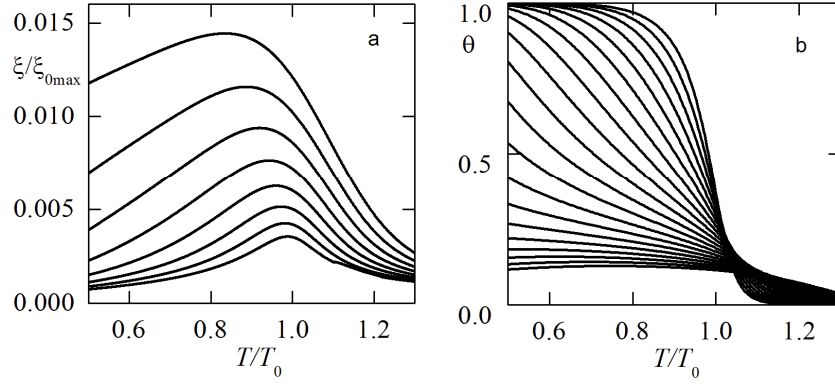


Рис.3. а) Зависимость корреляционной длины от температуры для значений параметров $\Delta_1=18$, $\Delta_2=11$, $Q=5$ и $\alpha \in [1.95; 2.77]$. Данные представлены в приведенных единицах $\xi/\xi_{0\max}$ и T/T_0 . б) Зависимость степени спиральности от температуры для того же набора параметров и в тех же единицах.

Потеря монотонности степени спиральности и, соответственно, отсутствие максимума на кривой температурной зависимости корреляционной длины имеет место, когда значение параметра α превышает некоторое критическое значение α^* .

Для одномасштабной модели ранее нами была получена оценка максимальной корреляционной длины $\xi_{\max} = Q^{\Delta-1/2} / 2$ [2,5-8]. Для двухмасштабной же модели получено соотношение [1]

$$\xi_{\max} = \frac{1}{2} Q^{\frac{(1-\alpha)(\Delta_1-1) + \alpha(\Delta_2-1)}{2}} = \frac{1}{2} Q^{\frac{\tilde{\Delta}-1}{2}}. \quad (13)$$

Поэтому мы связываем потерю максимума на кривой температурной зависимости корреляционной длины с условием $\tilde{\Delta} = 0$. Из формулы (13) следует, что

$$\alpha^* = \frac{\Delta_1}{\Delta_1 - \Delta_2}. \quad (14)$$

Дальнейшие исследования показали, что существование левого пика на температурной зависимости корреляционной длины тесно связано с тем, что значение второго собственного числа λ_2 комплексное. Когда присутствует лишь один пик (см. рис.1), λ_2 принимает действительные значения на протяжении всего исследуемого интервала. Если корреляционная длина демонстрирует два ярко выраженных пика, то λ_2 принимает вещественные значения на участке правого пика и мнимые значения на участке левого пика (см. рис.2). Когда присутствует лишь левый пик, λ_2 принимает только комплексные значения во всем исследованном температурном интервале (см. рис.3).

Таким образом, при $\alpha > 1$ температурное поведение корреляционной длины определяется двумя пиками. Один из них соответствует корреляциям, вызванным мелкомасштабным притяжением, а другой – антикорреляциям, вызванным отталкиванием большего масштаба. Возникновение второго пика связано с комплексным значением второго

собственного числа трансфер-матрицы (2) модели с двумя масштабами взаимодействия, описываемой гамильтонианом (1). Мелкомасштабное притяжение приводит к образованию длинных участков, в которых все повторяющиеся единицы находятся в упорядоченном, спиральном состоянии. Одновременно, присутствие крупномасштабного отталкивания разрушает такого рода упорядочение. Таким образом, когда значение α превышает единицу незначительно, влияние отталкивания мало. Но с увеличением значения α разрушительная роль отталкивания также увеличивается и пик корреляционной длины, вызванный притяжением, размывается. Для этих значений α поведение системы преимущественно определяется отталкиванием. В этом режиме система демонстрирует новый тип корреляций, когда ширина интервала перехода не может быть мерой кооперативности системы.

На наш взгляд, введение корреляционной длины позволяет объединить описание различных ситуаций и моделей, которые рассматривались в данной и предыдущей [1] статьях. Она дает возможность описать кооперативность такого рода сложной системы более четко, чем на языке кривых денатурации.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ш.А.Тоноян, Т.Ю.Бурякина, А.В.Царукян, Е.Ш.Мамасакхлисов, В.Ф.Морозов. Изв. НАН Армении, Физика, **42**, 466 (2007).
2. V.F.Morozov, A.V.Badasyan, A.V.Grigoryan, M.A.Sahakyan, E.Sh.Mamasakhlirov. Biopolymers, **75**, 434 (2004).
3. Sh.A.Hairyan, E.Sh.Mamasakhlirov, V.F.Morozov. Biopolymers, **35**, 75 (1995).
4. N.S.Ananikyan, Sh.A.Hairyan, E.Sh.Mamasakhlirov, V.F.Morozov. Biopolymers, **30**, 375 (1990).
5. A.V.Badasyan, A.V.Grigoryan, E.Sh.Mamasakhlirov, A.S.Benight, V.F.Morozov. J. Chem. Phys., **123**, 194701 (2005).
6. V.F.Morozov, A.V.Badasyan, A.V.Grigoryan, M.A.Sahakyan, E.Sh.Mamasakhlirov. Mod. Phys. Lett. B, **19**, 79 (2005).
7. А.В.Бадасян, А.В.Григорян, А.Ю.Чухаджян, Е.Ш.Мамасакхлисов, В.Ф.Морозов. Изв. НАН Армении, Физика, **37**, 320 (2002).
8. Е.Ш.Мамасакхлисов, А.В.Бадасян, В.Ф.Морозов. Изв. НАН Армении, Физика, **40**, 148 (2005).
9. V.S.Pande, A.Y.Grosberg, T.Tanaka. Rev. Mod. Phys., **72**, 265 (2000).
10. D.C.Poland, H.A.Sheraga. The Theory of Helix-Coil Transition. New York, Acad. Press, 1970.
11. R.M.Vartell, A.S.Benight. Phys. Rep., **126**, 67 (1985).
12. Ф.Р.Гантмахер. Теория матриц. М.-Л., Гостехиздат, 1953.

ՊՈԼԻՊԵՊՏԻԴԱՅԻՆ ՇՂԹԱՅԻ ԸՆԴՀԱՆՐԱՑՎԱԾ ՄՈԴԵԼԸ
ՊԱՐՈՒՐԱՅԻՆ ՏԵՂԱՄԱՍԻ ԵՐԿԱՐՈՒԹՅԱՆ ՎՐԱ
ՍԱՀՄԱՆԱՓԱԿՄԱՆ ԱՌԿԱՅՈՒԹՅԱՆ ԴԵՊՔՈՒՄ

Շ.Ա. ՏՈՆՈՅԱՆ, Գ.Ն. ՀԱՅՐԱՊԵՏՅԱՆ, Ա.Վ. ԾԱՌՈՒԿՅԱՆ,
Ե.Շ. ՄԱՄԱՍԱԽԼԻՍՈՎ, Վ.Ֆ. ՄՈՐՈԶՈՎ

Առաջարկված է մոդել՝ երկու գումարելիներից կազմված համիլտոնյանով, որոնք համապատասխանում են փոխազդեցության տարբեր մասշտաբներով ՊՇԸՄ համիլտոնյաններին: Դիտարկված է դեպք, երբ մեծամասշտաբ փոխազդեցությունները համապատասխանում են վանողությանը, մինչդեռ փոքրամասշտաբ փոխազդեցությունները համապատասխանում են ձգողությանը, ինչը համապատասխանում է համակարգի հալմանը կոմպակտ փաթեթավորման պայմաններում (գլոբուլացված պոլիպեպտիդ կամ ԴՆԹ կապսիդում): Տրանսֆեր-մատրիցային պատկերացումների շրջանակներում հաշվարկված են կոռելյացիոն երկարությունը (և պարուրության աստիճանը՝ (: Ցույց է տրված, որ կոռելյացիոն երկարության ջերմաստիճանային վարքը որոշվում է տրանսֆեր-մատրիցի երկրորդ սեփական արժեքի կոմպլեքս արժեքով: Այդ ո՞ժիմում համակարգը ցուցաբերում է կոռելյացիաների նոր տեսակ, երբ հալման միջակայքի լայնությունը չի կարող հանդիսանալ համակարգի կոոպերատիվության չափ:

GENERALIZED MODEL OF POLYPEPTIDE CHAIN
WITH LIMITATIONS ON THE LENGTH
OF HELICAL FRACTIONS

Sh.A. TONoyAN, G.N. HAYRAPETYAN, A.V. TSARUKYAN,
Y.SH. MAMASAKHLISOV, V.F. MOROZOV

A model with the Hamiltonian which consists of two parts corresponding to the Hamiltonian of GMPC with different scales of interaction is proposed. The case when long-scale interactions correspond to attraction is considered while short-scale interactions correspond to repulsion. This corresponds to the system melting in compact packing (globulized polypeptide or DNA in capsid). Within the framework of transfer-matrix approach the correlation length and helicity degree are calculated. It is shown that the thermal behavior of the correlation length is determined by complex values of the second eigenvalue of the transfer matrix. In this case the system shows a new type of correlation, when the melting interval cannot be used as a measure of the system cooperativity.

УДК 541.64

ЛИНЕЙНЫЙ ПОЛИМЕР С ВОДОРОДНЫМИ СВЯЗЯМИ КАК НЕРАВНОВЕСНАЯ СИСТЕМА

К.Г. САРГСЯН

Ереванский физический институт им. А.И.Алиханяна, Армения

(Поступила в редакцию 26 марта 2008 г.)

Предложено двухтемпературное неравновесное описание линейного полимера с возможным образованием водородных связей между мономерами. Молекула рассмотрена как находящаяся в адиабатическом стационарном состоянии, вдали от равновесия. Вычислена зависимость среднеквадратичного расстояния между концами цепи от числа мономеров в рамках простейшего подхода Флори для случая $T > \Theta$.

Линейный полимер представляет из себя макромолекулу, состоящую из огромного количества одинаковых звеньев – мономеров (мы ограничиваемся рассмотрением гомополимеров). Физика полимеров, начиная с 30-х годов прошлого века, достигла больших успехов в объяснении явлений, связанных с макромолекулами, начиная с эластичных свойств макромолекул и заканчивая явлениями, связанными со сложными биологическими полимерами (ДНК, РНК, белки). Фундаментальные концепции, полученные в результате этих исследований, можно найти в работах [1–3], в которых рассмотрены как поведение одиночной молекулы, так и явления в многополимерных системах.

В данной работе сделана попытка рассмотреть простейшую физику линейного полимера с возможным образованием водородных связей между мономерами. Яркими примерами таких полимеров (но только гетерополимеров) являются молекулы ДНК и особенно РНК. В случае последней можно рассматривать одну цепочку с возможностью образования насыщаемых водородных связей между мономерами. Для описания физики такой РНК-подобной макромолекулы мы учитываем разницу между энергиями ковалентных связей, соединяющих мономеры в полимерную цепь, и энергиями водородных связей между мономерами. Предполагается, что ковалентные связи можно рассматривать как неразрушаемые, а водородные связи с той или иной вероятностью образуются и разрушаются. При изучении РНК предполагают, что процесс сворачивания молекулы в биологически активную структуру происходит под воздействием физических сил и без помощи биологических агентов. На основе экспериментальных данных была предложена иерархическая модель сворачивания РНК [4], при которой вначале образуется термодинамически относительно устойчивая вторичная структура (совокупность всех водородных связей), а впоследствии данная система за счет физических взаимодействий переходит в биологически активную трехмерную конфигурацию (нативную конформацию макромолекулы) – третичную

структуру. Рассматривая переход из вторичной структуры в третичную, можно предполагать, что совокупность водородных связей меняется медленно, а также мало за малый промежуток времени по сравнению с координатами мономеров.

При рассмотрении перехода от вторичной к третичной структуре мы выделили быстрые степени свободы системы (координаты мономеров) и медленные (пары мономеров, образующих водородные связи, или одна степень свободы – число водородных связей). Саму макромолекулу можно представить как систему, связанную с термостатом с температурой T . Во многих работах совокупность водородных пар рассматривают как замороженный или частично-замороженный беспорядок [5]. В этом случае, в соответствии с теорией частично-замороженного беспорядка [6], удобно ввести дополнительную температуру T' , связанную со степенями свободы беспорядка (медленные переменные). Общая теория систем с медленными и быстрыми переменными, связанными с двумя термостатами при разных температурах, была построена в работе [7].

Согласно [7], если система описывается гамильтонианом $H[s, f]$, в котором быстрые переменные s связаны с термостатом при температуре T , медленные переменные f связаны с термостатом при температуре T' , а отношение скоростей медленных переменных и быстрых намного меньше единицы, то через некоторое время система выходит в стационарное, в общем случае, неравновесное состояние. Макроскопические величины в данном случае будут описываться с помощью квази-гиббсовского распределения

$$P(f) = \frac{Z^{T/T'}(f)}{Z}, \quad Z = \int_f Z^{T'}(f) df, \quad (1)$$

где интегрирование ведется по всей области значений f , а $Z(f)$ определяется как

$$Z(f) = \int_s \exp\left(-\frac{1}{T} H[s, f]\right) ds. \quad (2)$$

В качестве простейшего описания линейного полимера можно использовать модель “бусинок на нитке” [3]. В рамках данной модели вместо координат отдельных мономеров рассматриваются координаты “бусинок”, которые подчиняются следующему распределению вероятностей:

$$g(y_i) = \left(\frac{3}{2\pi a^2}\right)^{3/2} \exp(-3y_i^2 / 2a^2), \quad y_i = |x_{i+1} - x_i|, \quad (3)$$

где x_i – координата “бусинки”, а a^2 – среднеквадратичное расстояние между соседними “бусинками”. Если рассмотреть такую модель как газ “бусинок”, то мономеры, связанные между собой водородной связью, можно рассматривать как одну частицу. Такой подход оправдан в приближении длинных петель. В случае полного числа мономеров N и числа пар связанных водородной связью мономеров N_2 мы получим соотношение $N = 2N_2 + N_1$, где N_1 – число несвязанных мономеров. В качестве быстрых переменных можно использовать координаты “бусинок”, а в качестве медленных – число частиц N_2 . Используя подход Флори при температурах больше температуры Флори ($T > \Theta$), получаем

$$Z(N_2) = T \left(\frac{3R^2}{2(N - N_2)a^2} + v \frac{(N - N_2)^2}{R^3} \right), \quad (4)$$

где R – среднеквадратичное расстояние между концами цепи, а v – куб от характеристического радиуса объемных взаимодействий [3]. Используя условие минимума $\partial F / \partial R = 0$ свободной энергии $F = -T' \ln Z$, получаем соотношение $R \propto (N - N_2)^{3/5}$, отличающееся от результата для линейного полимера без водородных связей. Для нахождения зависимости R от N следует рассмотреть условие детального баланса для процесса образования пар связанных мономеров

$$N_2 e^{-\frac{\varepsilon}{T'}} = \frac{(N - N_2)^2}{R^3} v, \quad (5)$$

где ε – энергия образования водородной связи. Из соотношения (5) с учетом предыдущего результата легко видеть, что зависимость R от N определяется также температурой, связанной с беспорядком (T'), и имеет сложный вид. Из-за громоздкости полное выражение здесь не приведено, однако оно может быть получено с помощью элементарной алгебры. Стоит отметить что изложенный подход позволяет внести поправки и в остальные физические соотношения, характеризующие полимеры, вне зависимости от избранной модели полимерной цепи.

ЛИТЕРАТУРА

1. **P.J.Flory**. Statistical Mechanics of Chain Molecules. New York, Interscience, 1964.
2. **P.G. de Gennes**. Scaling Concepts in Polymer Physics. Ithaca, Cornell Univ. Press, 1979.
3. **I.M.Lifshitz, A.Y.Grosberg, A.R.Khokhlov**. Rev. Mod. Phys., **50**, 683 (1978).
4. **I.Tinoco, C.Bustamante**. J. Mol. Biol., **293**, 271 (1999).
5. **M.Lassig, K.J.Wiese**. Phys. Rev. Lett., **96**, 228101 (2006).
6. **V.Dotsenko**. Introduction to the Replica Theory of Disordered Statistical Systems. Cambridge; New York, Cambridge Univ. Press, 2001.
7. **A.E.Allahverdyan, Th.M.Nieuwenhuizen**. Phys. Rev. E, **62**, 016119 (2000).

ՋՐԱԾՆԱՅԻՆ ԿԱՊԵՐՈՎ ԳԾԱՅԻՆ ՊՈԼԻՄԵՐԸ
ՈՐՊԵՍ ԱՆՀԱՎԱՍԱՐԱԿՇԻՌ ՀԱՄԱԿԱՐԳ

Կ.Գ. ՍԱՐԳՍՅԱՆ

Առաջարկված է մոնոմերների միջև ջրածնային կապերով գծային պոլիմերի անհավասարակշիռ երկջերմաստիճանային նկարագրությունը: Մոլեկուլի վիճակը դիտարկված է որպես հավասարակշռությունից հեռու գտնվող ադիաբատային ստացիոնար վիճակ: Ֆլորիի պարզագույն տեսության հիման վրա հետազոտված է շղթայի ծայրերի միջև միջին քառակուսային հեռավորության և մոնոմերների թվի միջև կապը $T > \Theta$ տիրույթում:

LINEAR POLYMER WITH HYDROGEN BONDS
AS A NON-EQUILIBRIUM SYSTEM

K.G. SARGSYAN

A two-temperature far-from-equilibrium description of a linear polymer with hydrogen bonds between monomers is proposed. A molecule is considered being in the adiabatic steady state, which is the far-from-equilibrium one. The relation between mean square end-to-end distance and number of monomers is analyzed within the simple Flory approach under the condition $T > \Theta$.

ԲՈՎԱՆԴԱԿՈՒԹՅՈՒՆ

Ռ.Մ.Մովսեսյան, Ա.Ս.Սահակյան, Մ.Ա.Չալաբյան. Էլեկտրոնների սպին-մագնիսական միաչափ ցրման տեսության մասին.	247
Հ.Ս.Երիցյան, Ա.Ա.Պապոյան, Հ.Մ.Առաքելյան. Դասական օպտիկայի ալիքային վեկտորների ոչ դասական մակերևույթներով միջավայրեր.	252
Ա.Լ.Ասլանյան, Ա.Վ.Գալստյան, Ռ.Ս.Հակոբյան. Պոլիմերներում դիսպերսված հեղուկ բյուրեղային միջավայրերում հաստ դիֆրակցիոն ցանցերի գրման եռաչափ ոչ լոկալ դիֆուզիոն մոդել.	261
Վ.Ն.Մուղնեցյան, Ա.Ա.Կիրակոսյան. In-ի և Al-ի ատոմների փոխադարձ դիֆուզիայի ազդեցությունն էքսիտոնային վիճակների վրա $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$ քվանտային կետերում.	268
Ն.Ռ.Աղամալյան, Ռ.Կ.Հովսեփյան, Ս.Ի.Պետրոսյան. p -տիպի $\text{ZnO}:\text{Li}$ թաղանթներ p - n -անցումներ ստանալու համար.	274
Ն.Ս.Արամյան. Անհավասարակշռված լիցքատարների կյանքի տևողությունը p - n -անցումով կիսահաղորդչային դիոդի բազայում ինժեկցիայի կամայական մակարդակի դեպքում.	283
Ա.Ս.Մանուկյան, Պ.Ա.Վարդերեսյան, Ա.Ա.Միրզախանյան, Է.Գ.Շառոյան. Ալկալիական մետաղներով համասեռ լեզիրված ցինկի ֆտալոցիանինների ստացումը և մագնիսական հատկությունները.	293
Ս.Վ.Ժամկոչյան. Թանձրուկի ձևի բարակ լարով էմիսիոն դետեկտորի ժամանակային լուծողակա- նությունը.	301
Շ.Ա.Տոնոյան, Գ.Ն.Հայրապետյան, Ա.Վ.Ծառուկյան, Ե.Շ.Մամասախլիսով, Վ.Ֆ.Մորոզով. Պոլիպեպտիդային շղթայի ընդհանրացված մոդելը պարուրային տեղամասի երկարության վրա սահմանափակման առկայության դեպքում.	311
Կ.Գ.Տարգսյան. Ջրածնային կապերով գծային պոլիմերը որպես անհավասարակշիռ համակարգ.	319

CONTENTS

R.M.Movsessyan, A.S.Sahakyan, M.A.Chalabyan. On the theory of one-dimensional spin-magnetic scattering of electrons.	247
H.S.Erytsyan, A.A.Papoyan, H.M.Arakelyan. Media with non-classical forms of the surfaces of wave vectors of classical optics.	252
A.L.Aslanyan, A.V.Galstyan, R.S.Hakobyan. Nonlocal 3D diffusion model of writing thick diffraction gratings in polymer-dispersed liquid crystals.	261
V.N.Mughnetsyan, A.A.Kirakosyan. Effect of interdiffusion of In and Al atoms on excitonic states in $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$ quantum dots.	268
N.R.Aghamalyan, R.K.Hovsepyan, S.I.Petrosyan. p -type ZnO films for preparation of p - n -junctions. . .	274
N.S.Aramyan. Lifetime of non-equilibrium charge carriers in the base of p - n -junction semiconductor diode at arbitrary injection levels.	283
A.S.Manukyan, P.A.Varderesyan, A.A.Mirzakhanyan, E.G.Sharoyan. Preparation and magnetic properties of zinc phthalocyanines homogeneously doped with alkaline metals.	293
S.V.Zhamkochyan. Time resolution of the bunch shape detector with a thin-wire emission target.	301
Sh.A.Tonoyan, G.N.Hayrapetyan, A.V.Tsarukyan, Y.Sh.Mamasakhlishov, V.F.Morozov. Generalized model of polypeptide chain with limitations on the length of helical fractions.	311
K.G.Sargsyan. Linear polymer with hydrogen bonds as a non-equilibrium system.	319

СОДЕРЖАНИЕ

Р.М.Мовсесян, А.С.Саакян, М.А.Чалабян. К теории одномерного спин-магнитного рассеяния электронов.	247
О.С.Ерицян, А.А.Папоян, О.М.Аракелян. Среды с неклассическими формами поверхностей волновых векторов классической оптики. . .	252
А.Л.Асланян, А.В.Галстян, Р.С.Акопян. Нелокальная 3D диффузионная модель записи толстых дифракционных решеток в полимерно-диспергированных жидких кристаллах.	261
В.Н.Мутнецян, А.А.Кирикасян. Влияние взаимной диффузии атомов In и Al на экситонные состояния в квантовых точках $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$	268
Н.Р.Агамалян, Р.К.Овсебян, С.И.Петросян. Пленки $\text{ZnO}:\text{Li}$ <i>p</i> -типа для получения <i>p</i> (<i>n</i> -переходов).	274
Н.С.Арамян. Время жизни неравновесных носителей заряда в базе полупроводникового диода с <i>p</i> – <i>n</i> -переходом при произвольных уровнях инжекции.	283
А.С.Манукян, П.А.Вардересян, А.А.Мирзаханян, Э.Г.Шароян. Получение и магнитные свойства фталоцианинов цинка, однородно допированных щелочными металлами.	293
С.В.Жамкочян. Временное разрешение детектора формы сгустка с тонкой эмиссионной проволокой-мишенью.	301
Ш.А.Тоноян, Г.Н.Айрапетян, А.В.Царукян, Е.Ш.Мамасахлисов, В.Ф.Морозов. Обобщенная модель полипептидной цепи при наличии ограничения на длину спирального участка.	311
К.Г.Саргсян. Линейный полимер с водородными связями как неравновесная система.	319

Заказ № 210.

Тираж 100. Сдано в набор 28.03.2008.

Подписано к печати 17.04.2008. Печ. л. 5.

Бумага офсетная. Цена договорная.

Типография НАН РА.

Ереван, пр. Маршала Баграмяна, 24.