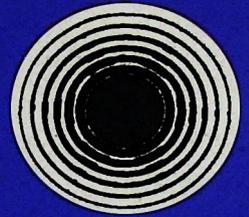


ՓԻՅԻԿԱ · ՖԻԶԻԿԱ · PHYSICS



ИЗВЕСТИЯ
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК АРМЕНИИ

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ
ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ԳԻՏՈՒԴՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ

PROCEEDINGS
OF NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF ARMENIA

43, N5, 2008

ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ՀԱՆՐԱՊԵՏՈՒԹՅԱՆ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱ
НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК РЕСПУБЛИКИ АРМЕНИЯ

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ ИЗВЕСТИЯ
ՖԻԶԻԿԱ ФИЗИКА

ՀԱՏՈՐ ԿՈՄ

43

№ 5

ՀՀ ԳԱՍ "ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆ" ՀՐԱՏԱՐԱԿՈՒԹՅՈՒՆ

ИЗДАТЕЛЬСТВО "ТИТУТЮН" 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

ԽՄԲԱԳՐԱԿԱՆ ԿՈՆԵԳԻԱ

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

EDITORIAL BOARD

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

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

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

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

УДК 621.315

ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОЙ ПРИМЕСИ НА ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СФЕРИЧЕСКОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКИ ZnSe

А.Х. МАНАСЕЛЯН, А.В. КАЗАРЯН, А.А. КИРАКОСЯН

Ереванский государственный университет, Армения

(Поступила в редакцию 18 января 2008 г.)

Рассмотрены электронные и дырочные состояния в полупроводниковой сферической квантовой точке из ZnSe, в центре которой находится магнитный примесный атом марганца. В расчетах квантовая точка аппроксимируется сферической прямоугольной ямой конечной глубины. С помощью теории возмущений рассмотрено влияние обменного спинового взаимодействия электрона и дырки с магнитной примесью на зонную структуру системы. Исследован также оптический спектр системы для различных поляризацій падающего света.

1. Введение

В последние годы интенсивно исследуются свойства магнитных полупроводниковых систем $\text{III-xMn}_x\text{V}$ и $\text{II-xMn}_x\text{VI}$ вследствие их важности как для фундаментальной физики, так и возможных применений в спинтронике и в квантовой информатике [1,2]. В таких системах спиновые обменные взаимодействия электронов и дырок с магнитными примесями играют важную роль, что, в свою очередь, приводит к необходимости учета сложной структуры валентной зоны этих соединений. Впервые эта задача была рассмотрена в работе Кона и Латтинджера [3], где методом **kp**-теории получен матричный вид гамильтониана для зон тяжелых и легких дырок (гамильтониан Латтинджера в 4-зонном приближении) как без учета, так и с учетом спин-орбитального взаимодействия. В работе [4] рассмотрен более общий случай и приведен обобщенный гамильтониан Латтинджера, в котором учтены зона проводимости Γ_6 , зона тяжелых дырок Γ_8 и расщепленная зона Γ_7 (8-зонное приближение). Следует отметить также работы [5-7], в которых исследована зонная структура магнитных полупроводников в магнитном поле и учтено обменное взаимодействие электронов и дырок с атомами магнитной примеси.

В низкоразмерных полупроводниковых гетероструктурах, вследствие кардинальной перестройки законов дисперсии носителей заряда (НЗ), следует ожидать новых проявлений взаимодействия НЗ с магнитными примесями. Одной из первых в этой области является работа [8], где предложен аналитический метод определения зонной структуры сферических квантовых точек (КТ) и цилиндрических квантовых проволок в много-зонном приближении.

Следует особо отметить работы [9-11], где исследованы полупроводниковые низкоммерные системы с магнитными примесями и показано, что в таких системах возможно

управление спиновыми состояниями примеси.

В данной работе рассмотрены электронные и дырочные состояния в полупроводниковой сферической КТ из ZnSe, в центре которой находится магнитный примесный атом марганца (Mn). В расчетах КТ аппроксимируется сферической прямоугольной ямой конечной глубины. С помощью теории возмущений рассмотрено влияние обменного спинового взаимодействия электрона и дырки с магнитной примесью на зонную структуру. Исследован также оптический спектр данной системы для различных поляризацій падающего света.

2. Теория

Рассмотрим сферическую КТ из ZnSe с радиусом a . В условиях сильного размерного квантования, когда радиус КТ меньше борковского радиуса экситона в массивном образце, волновую функцию системы “электрон + дырка” можно представить в виде

$$\Psi_{m\mu}^{eh}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \Psi_m^e(\mathbf{r}_e) \Psi_\mu^h(\mathbf{r}_h). \quad (1)$$

Волновая функция электрона в основном состоянии имеет следующий вид [9]:

$$\Psi_m^e(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \phi(\mathbf{r}) u_m^c(\mathbf{r}), \quad (2)$$

где $u_m^c(\mathbf{r})$ – блоховские функции в центре зоны Бриллюэна в зоне проводимости ($m = s_z = \pm 1/2$) [9]:

$$u_{1/2}^c(\mathbf{r}) = |s\rangle |\uparrow\rangle, \quad u_{-1/2}^c(\mathbf{r}) = |s\rangle |\downarrow\rangle.$$

В рамках модели прямоугольной ямы конечной глубины огибающую волновую функцию электрона можно представить в виде [12]

$$\phi(r) = \frac{C}{\sqrt{4\pi}} \begin{cases} j_0(kr), & r \leq a, \\ \frac{j_0(ka)}{h_0(i\lambda a)} h_0(i\lambda r), & r > a, \end{cases} \quad (3)$$

где $k = \sqrt{2m_e(E - E_{c1})/\hbar^2}$, $\lambda = \sqrt{2m_e(E_{c2} - E)/\hbar^2}$, $E_{c1}(E_{c2})$ – дно зоны проводимости для КТ (для барьера), $j_l(z)$ и $h_l(z)$ – соответственно, сферические функции Бесселя и Ганкеля [13], C – постоянная нормировки.

В рамках сферической аппроксимации гамильтониан Латтинджера для зоны тяжелых и легких дырок (зона Γ_8) можно представить в следующем виде [3,8]:

$$\hat{H}_{\Gamma_8} = \begin{matrix} & \begin{matrix} |3/2, 3/2\rangle & |3/2, 1/2\rangle & |3/2, -1/2\rangle & |3/2, -3/2\rangle \end{matrix} \\ \begin{matrix} |3/2, 3/2\rangle \\ |3/2, 1/2\rangle \\ |3/2, -1/2\rangle \\ |3/2, -3/2\rangle \end{matrix} & \begin{pmatrix} E_v + T/2 & -iL & -M & 0 \\ iL^* & E_v + T/6 + 2Q/3 & 0 & -M \\ -M^* & 0 & E_v + T/6 + 2Q/3 & iL \\ 0 & -M^* & -iL^* & E_v + T/2 \end{pmatrix} \end{matrix}, \quad (4)$$

где

$$-\frac{T}{2} = (\gamma_1 + \gamma) \frac{k_x^2 + k_y^2}{2} + (\gamma_1 - 2\gamma) \frac{k_z^2}{2}, \quad -\left(\frac{T}{6} + \frac{2Q}{3}\right) = (\gamma_1 - \gamma) \frac{k_x^2 + k_y^2}{2} + (\gamma_1 + 2\gamma) \frac{k_z^2}{2},$$

$$-L = -i2\sqrt{3}\gamma \frac{(k_x - ik_y)k_z}{2}, \quad -M = \sqrt{3}\gamma \frac{(k_x - ik_y)^2}{2}, \quad \gamma = \frac{2\gamma_2 + 3\gamma_3}{5},$$

$\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ – параметры Латтинджера. Если в системе имеется также ограничивающий потенциал $V(r)$, то волновая функция частиц состоит из блоховских функции и огибающей функции. В таких задачах часто бывает удобным переход из одночастичной задачи к “двухчастичной”, то есть рассматривать “блоховскую частицу” с собственным моментом $\hat{\mathbf{j}}$ и “огибающую частицу” с собственным моментом $\hat{\mathbf{l}}$. Из-за сферической симметрии системы оператор Гамильтона \hat{H}_{Γ_8} коммутирует с оператором квадрата суммарного момента $\hat{\mathbf{F}} = \hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{l}}$ и с оператором его проекции \hat{F}_z . Поэтому с помощью собственных базисных функций $\hat{\mathbf{F}}^2$ и \hat{F}_z

$$|\mathbf{k}, F, F_z, j, l\rangle = \sum_{j_z=-j}^j \sum_{l_z=-l}^l C_{j, j_z; l, l_z}^{F, F_z} |j, j_z\rangle |\mathbf{k}, l, l_z\rangle \quad (5)$$

гамильтониан можно привести к блочно-диагональному виду, где каждому значению F соответствует свой блок [8]. В (5) $C_{j, j_z; l, l_z}^{F, F_z}$ – коэффициенты Клебша–Гордана, $|j, j_z\rangle$ – блоховские функции для валентной зоны Γ_8 ($j = 3/2$):

$$\left|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle = -\sqrt{\frac{1}{2}}(|x\rangle + i|y\rangle)|\uparrow\rangle, \quad \left|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}(|x\rangle - i|y\rangle)|\downarrow\rangle,$$

$$\left|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|z\rangle|\uparrow\rangle - \sqrt{\frac{1}{6}}(|x\rangle + i|y\rangle)|\downarrow\rangle, \quad \left|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|z\rangle|\downarrow\rangle + \sqrt{\frac{1}{6}}(|x\rangle - i|y\rangle)|\uparrow\rangle,$$

где $|x\rangle, |y\rangle$ и $|z\rangle$ – орбитальные функции с симметрией p_x, p_y и p_z , соответственно.

Огибающую волновую функцию можно представить в виде [8,14]

$$|\mathbf{k}, l, l_z\rangle = \sqrt{\frac{2}{\pi}} i^l j_l(kr) Y_{l, l_z}(\theta, \varphi), \quad (6)$$

где $j_l(kr)$ – сферические функции Бесселя, $Y_{l, l_z}(\theta, \varphi)$ – сферические гармоники. Воспользовавшись базисными функциями (5) для матричных элементов гамильтониана, получим [8]:

$$\langle \mathbf{k}, F, F_z; j, l | H_{\Gamma_8} | \mathbf{k}, F', F'_z; j', l' \rangle = \sum_{j_z=-j}^j \sum_{j'_z=-j'}^{j'} C_{j, j_z; l, l_z}^{F, F_z} C_{j', j'_z; l', l'_z}^{F', F'_z} \times$$

$$\times \int d\Omega_k (Y_l^{F_z - j_z}(\Omega_k))^* Y_{l'}^{F'_z - j'_z}(\Omega_k) \langle \mathbf{k}, j, j_z | H_{\Gamma_8} | \mathbf{k}, j', j'_z \rangle, \quad (7)$$

где $\Omega_k = (\theta_k, \varphi_k)$ – полярные координаты вектора \mathbf{k} , а матричные элементы $\langle \mathbf{k}, j, j_z | H_{\Gamma_8} | \mathbf{k}, j', j'_z \rangle$ даны в (4).

Найдем энергию основного состояния в зоне Γ_8 , когда $F = 3/2$ и, следовательно, $F_z = \pm 3/2, \pm 1/2$. В этом случае мы получим 4 базисные функции (для простоты вместо $|\mathbf{k}, F, F_z, j, l\rangle$ записано $|j, l\rangle$):

$$|j, l\rangle = \left| \frac{3}{2}, 0 \right\rangle, \left| \frac{3}{2}, 1 \right\rangle, \left| \frac{3}{2}, 2 \right\rangle, \left| \frac{3}{2}, 3 \right\rangle, \quad (8)$$

а для матричного вида гамильтониана получим

$$H_{\Gamma_8}^{F=3/2} = \begin{matrix} & \left| \frac{3}{2}, 0 \right\rangle & \left| \frac{3}{2}, 2 \right\rangle & \left| \frac{3}{2}, 1 \right\rangle & \left| \frac{3}{2}, 3 \right\rangle \\ \begin{matrix} \left| \frac{3}{2}, 0 \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, 2 \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, 1 \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, 3 \right\rangle \end{matrix} & \begin{pmatrix} E_V - \gamma_1 \frac{k^2}{2} & 2\gamma \frac{k^2}{2} & 0 & 0 \\ 2\gamma \frac{k^2}{2} & E_V - \gamma_1 \frac{k^2}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_V - \left(\gamma_1 - \frac{8}{5}\gamma \right) \frac{k^2}{2} & \frac{6}{5}\gamma \frac{k^2}{2} \\ 0 & 0 & \frac{6}{5}\gamma \frac{k^2}{2} & E_V - \left(\gamma_1 + \frac{8}{5}\gamma \right) \frac{k^2}{2} \end{pmatrix} & \end{matrix} \quad (9)$$

Как видно, матрица (9) блочно-диагональна: верхнему блоку соответствуют четные состояния, а нижнему – нечетные. Для четных состояний тяжелых и легких дырок имеем

$$|HH\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{3}{2}, 0 \right\rangle + \left| \frac{3}{2}, 2 \right\rangle \right), \quad |LH\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{3}{2}, 0 \right\rangle - \left| \frac{3}{2}, 2 \right\rangle \right). \quad (10)$$

Так как в КТ не могут существовать чисто тяжелые или легкие состояния дырок, то волновую функцию основного состояния в валентной зоне Γ_8 представим как

$$\Psi_{F_z}^h(r) = A|HH\rangle + B|LH\rangle = \sum_{j_z} f_{F_z, j_z}(r) |j, j_z\rangle, \quad (11)$$

где $F_z = \pm 3/2, \pm 1/2$ и $j_z = \pm 3/2, \pm 1/2$, а для огибающей волновой функции f_{F_z, j_z} получим: в области КТ

$$f_{F_z, j_z}(r) = \frac{\delta_{F_z, j_z}}{\sqrt{4\pi}} [A_1 j_0(k_{HH}r) + B_1 j_0(k_{LH}r)] - C_{3/2, j_z, 2, F_z - j_z}^{3/2, F_z} [A_1 j_2(k_{HH}r) - B_1 j_2(k_{LH}r)] Y_{2, F_z - j_z}(\theta, \varphi), \quad (12)$$

в области барьера

$$f_{F_z, j_z}(r) = \frac{\delta_{F_z, j_z}}{\sqrt{4\pi}} [A_2 h_0(i\lambda_{HH}r) + B_2 j_0(i\lambda_{LH}r)] - C_{3/2, j_z, 2, F_z - j_z}^{3/2, F_z} [A_2 h_2(i\lambda_{HH}r) - B_2 j_2(i\lambda_{LH}r)] Y_{2, F_z - j_z}(\theta, \varphi). \quad (13)$$

В (12), (13) введены следующие обозначения:

$$\begin{aligned} k_{HH} &= \sqrt{2m_{HH}(E_{v1} - E)/\hbar^2}, & k_{LH} &= \sqrt{2m_{LH}(E_{v1} - E)/\hbar^2}, \\ \lambda_{HH} &= \sqrt{2m_{HH}(E - E_{v2})/\hbar^2}, & \lambda_{LH} &= \sqrt{2m_{LH}(E - E_{v2})/\hbar^2}, \end{aligned} \quad (14)$$

m_{HH} (m_{LH}) – эффективная масса тяжелой (легкой) дырки, E_{v1} (E_{v2}) – потолок валентной зоны для КТ (для барьера). Энергию основного состояния дырки определим из условия непрерывности огибающей волновой функции:

$$\det \begin{vmatrix} j_0(k_{HH}a) j_0(k_{LH}a) h_0(i\lambda_{HH}a) & h_0(i\lambda_{LH}a) \\ j_2(k_{HH}a) - j_2(k_{LH}a) & h_2(i\lambda_{HH}a) & -h_2(i\lambda_{LH}a) \\ j'_0(k_{HH}a) j'_0(k_{LH}a) h'_0(i\lambda_{HH}a) & h'_0(i\lambda_{LH}a) \\ j'_2(k_{HH}a) - j'_2(k_{LH}a) & h'_2(i\lambda_{HH}a) & -h'_2(i\lambda_{LH}a) \end{vmatrix} = 0. \quad (15)$$

Рассмотрим теперь КТ, в которой находится магнитный примесный атом марганца Mn. Обменное взаимодействие электрона с d-электроном атома Mn имеет вид [6]

$$H_{ex} = -J(\mathbf{r} - \mathbf{R})\hat{\mathbf{S}}, \quad (16)$$

где $\hat{\mathbf{S}}$ – оператор собственного момента атома Mn. С помощью теории возмущений для матричного элемента точечного обменного взаимодействия получим:

$$\langle \Psi_m^e | H_{ex}^e | \Psi_n^e \rangle = -\alpha |\phi(R)|^2 \langle m | \hat{\mathbf{S}} | n \rangle, \quad (17)$$

где $\alpha = \langle s | J | s \rangle, |s\rangle$ – орбитальные волновые функции сферической симметрии в зоне проводимости, $|m\rangle$ – собственные функции оператора проекции спина электрона \hat{s}_z .

Таким же образом для обменного взаимодействия дырки с атомом Mn получим

$$\langle \Psi_\mu^h | H_{ex}^h | \Psi_\nu^h \rangle = -\frac{\beta}{3} \sum_{\lambda, \xi} f_{\lambda\mu}^*(R) \langle \lambda | \hat{\mathbf{j}}\hat{\mathbf{S}} | \xi \rangle f_{\xi\nu}(R), \quad (18)$$

где $\beta = \langle x | J | x \rangle = \langle y | J | y \rangle = \langle z | J | z \rangle$ [6], $|\lambda\rangle$ – собственные функции оператора проекции спина дырки \hat{j}_z .

Для атома магнитной примеси в центре КТ спиновый гамильтониан взаимодействия электрона и дырки с d-электроном атома Mn можно представить в виде

$$H_{ex}^{eh} = -I_e(\hat{\mathbf{s}}\hat{\mathbf{S}}) - I_h(\hat{\mathbf{j}}\hat{\mathbf{S}}), \quad (19)$$

где $I_e = \alpha |\phi(0)|^2 = C^2 N_0 \alpha \frac{a_L^3}{16\pi}$, $I_h = \frac{\beta}{3} |f(0)|^2 = N_0 \beta \frac{a_L^3}{48\pi} (A_1 + B_1)^2$, N_0 – концентрация катионов, a_L – постоянная решетки.

Заметим, что оператор $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{s}} + \hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{S}}$ коммутирует с H_{ex}^{eh} , и “хорошими” квантовыми числами являются s, j, S, J, J_z . Для данного значения J спиновые функции $|1\rangle = |S+1/2, j, J, J_z\rangle$ и $|2\rangle = |S-1/2, j, J, J_z\rangle$ являются базисными. Воспользовавшись этими функциями и соответствующими коэффициентами Рака, для матричных элементов спинового гамильтониана получим:

$$H_{11} = -\frac{I_e}{2} S - \frac{I_h}{2} (U + D_1), \quad H_{12} = H_{21} = \frac{1}{2} I_h \sqrt{D_1 D_2}, \quad H_{22} = \frac{I_e}{2} (S+1) - \frac{I_h}{2} (U + D_2), \quad (20)$$

где введены следующие обозначения:

$$U = J^2 - S(S+1) - (j+1/2)^2, \quad D_1 = \frac{(j+1/2)^2 - (J-S)^2}{2S+1}, \quad D_2 = \frac{(J+S+1)^2 - (j+1/2)^2}{2S+1}.$$

Таким образом, для данного значения J получим два собственных значения гамильтониана H_{ex}^{eh} :

$$E_{\pm}^J = \frac{1}{4}(I_e - I_h) - \frac{I_h}{2} \left[\left(J + \frac{1}{2} \right)^2 - \left(S + \frac{1}{2} \right)^2 - \left(j + \frac{1}{2} \right)^2 \right] \pm \frac{1}{2} \left[- \left(J + \frac{1}{2} \right)^2 (I_e - I_h) I_h + \left(S + \frac{1}{2} \right)^2 (I_e - I_h) I_e + \left(j + \frac{1}{2} \right)^2 I_e I_h \right]^{1/2}. \quad (21)$$

Собственные функции спинового гамильтониана определяются как

$$|J, \pm, J_z\rangle = c_1 |1\rangle + c_2 |2\rangle, \quad (22)$$

где коэффициенты c_1, c_2 являются собственными векторами H_{ex}^{eh} . Функции $|1\rangle$ и $|2\rangle$, в свою очередь, можно представить в термах $|1/2, s_z\rangle |j, j_z\rangle |S, S_z\rangle$, используя соответствующие коэффициенты Клебша–Гордана.

Для электрона в КТ из ZnSe $s=1/2$, для дырки $j=3/2$, а для магнитного атома марганца $S=5/2$, поэтому получается 8 энергетических уровней: $J=1/2(1), 3/2(2), 5/2(2), 7/2(2), 9/2(1)$, где числа в скобках указывают число уровней. Заметим, однако, что состояния с $J=1/2$ и $J=9/2$ запрещены для оптических переходов, потому что не имеют проекций на дипольно активные экситонные состояния с $j_{\text{ex}}=1$:

$$|1,1\rangle = -\frac{1}{2} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle, \quad |1,0\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ |1,-1\rangle = -\frac{\sqrt{3}}{2} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle + \frac{1}{2} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle, \quad (23)$$

которым соответствуют поляризации света σ^+ , π , σ^- .

Так как $I_e > 0$, а $I_h < 0$, то энергия основного состояния системы будет $E_-^{3/2}$, а максимальная энергия системы будет $E_+^{7/2}$. Разность между этими уровнями можно назвать энергией расщепления экситона: $\Delta = E_+^{7/2} - E_-^{3/2}$.

Для изучения спектра поглощения КТ предположим, что в начальном состоянии валентная зона КТ полностью заполнена. Тогда волновая функция начального состояния определится только собственными функциями спина Мп: $|i\rangle = |S, S_z\rangle$. После взаимодействия с фотоном система переходит в конечные состояния, определенные нами: $|f\rangle = |J, \pm, J_z\rangle$. В рамках электрического дипольного приближения для относительных интенсивностей шести разрешенных переходов получим:

$$P^{J,\pm} = \left| \langle J, \pm, J_z | 1, m \rangle | S, S_z \rangle \right|^2, \quad (24)$$

где $m=1,0,-1$ характеризует поляризацию света. В конечном состоянии должно выполняться условие $J_z = m + S_z$.

3. Результаты

Численные расчеты нами проведены для квантовой точки из ZnSe. Используются следующие значения параметров: $m_e = 0.17m_0$, $m_{HH} = 0.41m_0$, $m_{LH} = 0.16m_0$, $E_{v1} = 0$, $E_{c1} = 2.7$ эВ, $E_{v2} = -0.3$ эВ, $E_{c2} = 3.2$ эВ, $N_0\alpha = 0.29$ эВ, $N_0\beta = -1.4$ эВ [9].

На рис.1 представлены зависимости энергетических уровней электрона от радиуса КТ в зоне проводимости (рис.1а) и в валентной зоне (рис.1б). Как видно из рисунков, с увеличением радиуса КТ энергетические уровни в зоне проводимости опускаются вниз, стремясь ко дну зоны, а в валентной зоне повышаются, стремясь к потолку зоны. Такое поведение энергетических уровней обусловлено ослаблением роли размерного квантования с увеличением радиуса КТ.

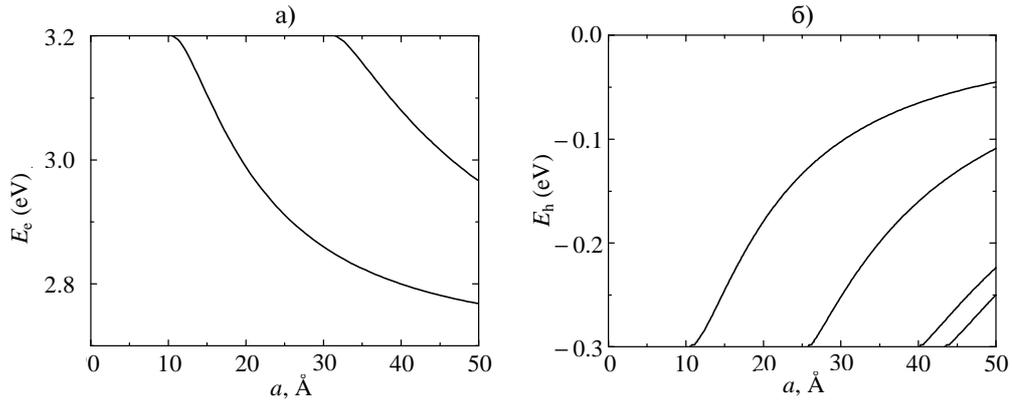


Рис.1. Зависимость энергетических уровней электрона от радиуса КТ:
а) в зоне проводимости, б) в валентной зоне.

На рис.2 представлены относительные интенсивности оптических переходов из начального состояния с $S_z = -5/2$ в конечные состояния $|J, \pm, J_z\rangle$ для различных поляриза-ций света (σ^- , σ^+ , π) для КТ с радиусом 15Е. Сплошные линии соответствуют модели потенциальной ямы конечной глу-бины, штриховые – бесконечно глубокой ямы.

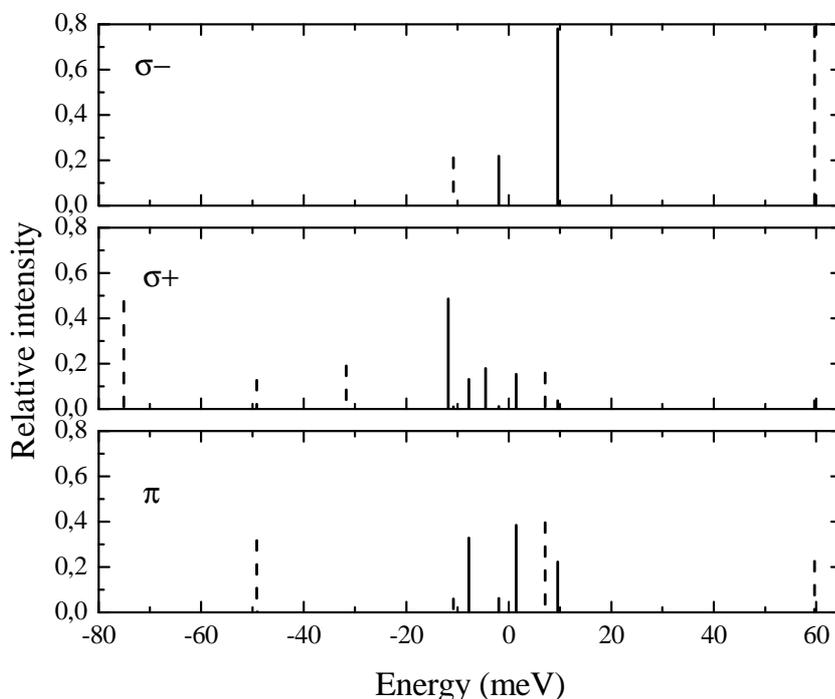


Рис.2. Относительные интенсивности оптических переходов из состояния $|S = 5/2, S_z = -5/2\rangle$ в состояния $|J, \pm, J_z\rangle$ для поляризации света σ^- , σ^+ , π .

Для σ^- -поляризации в конечном состоянии $J_z = -7/2$, и возможны только два пере-хода в состояния с $J = 7/2$. Для σ^+ -поляризации $J_z = -3/2$, и возможны шесть переходов в состояния с $J = 7/2, 5/2$ и $3/2$. Разность между самыми интенсивными линиями для σ^- и σ^+ -поляриза-ций равна Δ . Если в начальном состоянии $S_z = 5/2$, то рисунки для σ^- - и σ^+ -поляриза-ций поменяются местами и Δ поменяет знак. Следовательно, с помощью оптических спектров поглощения такой системы можно определить началь-ное состояние спина магнитного атома.

Учет конечности ограничивающего потенциала приводит к сближе-нию энергетических уровней конечных состояний, и Δ уменьшается. Это можно объяснить уменьшением вероятности нахождения электрона и дырки в центральной части КТ, где находится примесный магнитный атом.

Работа выполнена в рамках государственной целевой программы Республики Армения “Полупроводниковая наноэлектроника”.

ЛИТЕРАТУРА

1. **T. Dietl.** *Semicond. Sci. Technol.*, **17**, 377 (2002).
2. **E.H. Hwang, S. Das Sarma.** *Phys. Rev. B*, **72**, 035210 (2005).
3. **J.M. Luttinger, W. Kohn.** *Phys. Rev.* **97**, 869 (1955).
4. **A.L. Efros, M. Rosen.** *Phys. Rev. B*, **58**, 7120 (1998).
5. **C.R. Pidgeon, R.N. Brown.** *Phys. Rev.* **146**, 575 (1966).
6. **N.B. Brandt, V.V. Moshchalkov.** *Advances in Physics*, **33**, 193 (1984).
7. **G.D. Sanders, Y. Sun, F.V. Kyrychenko et al.** *Phys. Rev. B*, **68**, 165205 (2003).
8. **P.C. Sercel, K.J. Vahala.** *Phys. Rev. B*, **42**, 3690 (1990).
9. **A.K. Bhattacharjee, J. Perez-Conde.** *Phys. Rev. B*, **68**, 045303 (2003).
10. **K. Chang, S.S. Li, J.B. Xia, F.M. Peeters.** *Phys. Rev. B*, **69**, 235203 (2004).
11. **A.A. Gorovov, A.V. Kalameitsev.** *Phys. Rev. B*, **71**, 035338 (2005).
12. **J.H. Davies.** *The physics of low-dimensional semiconductors*, Cambridge University Press, 1998.
13. Справочник по специальным функциям. Под ред. **М. Абрамовица и И. Стиган.** М., Наука, 1979.
14. **Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц.** *Квантовая механика*, М., Наука 1974.

Մագնիսական խառնուկի ազդեցությունը ZnSe գնդային քվանտային կետի
օպտիկական հատկություն-ների վրա.

Ա. Խ.Մանասելյան, Ա. Վ.Ղազարյան, Ա. Ա.Կիրակոսյան.

Դիտարկվել են էլեկտրոնային և խոռոչային վիճակները ZnSe կիսահաղորդչային գնդային քվանտային կետում, որի կենտրոնում գտնվում է մանգանի (Mn) մագնիսական խառնուկային ատոմը: Հաշվարկներում քվանտային կետը մոտարկված է գնդային, վերջավոր խորությամբ ուղղանկյուն փոսով: Խոտորումների տեսությամբ դիտարկված է մագնիսական խառնուկի հետ էլեկտրոնի և խոռոչի փոխանակային սպինային փոխազդեցության ազդեցությունը համակարգի գոտիական կառուցվածքի վրա: Հետազոտված է նաև համակարգի օպտիկական սպեկտրը լույսի տարբեր բևեռացվածությունների դեպքում:

EFFECT OF A MAGNETIC IMPURITY ON THE OPTICAL PROPERTIES OF A SPHERICAL ZnSe QUANTUM DOT

A.KH. MANASELYAN, A.V. GHAZARYAN, A.A. KIRAKOSYAN

The electron and hole states in semiconductor spherical quantum dot of ZnSe, in the center of which the magnetic impurity atom of manganese (Mn) is placed, are investigated. In calculations the quantum dot is approximated by a spherical rectangular well with a finite depth. In the framework of perturbation theory the effect of exchange spin interaction of electron and hole with magnetic impurity on the band structure of the system is considered. The optical spectrum of the system for different polarizations of the incident light is investigated also.

УДК 621.315

ОПТИЧЕСКОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ В ПОЛУПРОВОДНИКОВОМ НАНОЦИЛИНДРИЧЕСКОМ СЛОЕ

В.А. АРУТЮНЯН, С.Л. АРУТЮНЯН, Г.О. ДЕМИРЧЯН, Н.Г. ГАСПАРЯН

Гюмрийский филиал Государственного инженерного университета Армении

(Поступила в редакцию 17 февраля 2008 г.)

В приближении изотропной эффективной массы рассмотрены одноэлектронные состояния в полупроводниковом наноцилиндрическом слое в режиме “сильного” квантования. Получен явный вид энергетического спектра и огибающих волновых функций для случаев “большого” и “умеренного” радиусов слоя по отношению к его толщине. Для этих случаев рассчитаны также полосы поглощения, соответствующие дипольным и квадрупольным оптическим переходам в слое.

1. Введение

Наряду со многими низкоразмерными полупроводниками нанотрубки в настоящее время являются одним из самых актуальных объектов исследования в физике низкоразмерных систем, что обусловлено перспективностью применения подобных гетерофазных структур в приборах твердо-тельной квантовой электроники [1,2]. Большая часть работ, касающихся названных трубчатых структур, посвящена углеродным нанотрубкам (см., например, работы [3,4] и цитированную в них литературу). Однако последние годы отмечены успехами также и в технологии получения полупроводниковых цилиндрических нанотрубок – пока что соединений $A^{III}B^V$, Si, Ge [5-8]. При этом очень важно, что благодаря гибкости технологий, радиус и толщина слоя являются контролируемыми параметрами и могут варьироваться в довольно широких пределах. Поведение электронной подсистемы в полупроводниковых нанотрубках, при всем своем сходстве с аналогичными процессами в углеродных нанотрубках, проявляет и ряд существенных особенностей и отличий, обусловленных именно спецификой материала. В связи с этим, естественно, что определенный интерес представляет исследование физических свойств “отдельно взятого” полупроводникового цилиндрического слоя, который может иметь прикладное применение как в “чистом виде”, так и в качестве составной компоненты более сложной структуры (например, аксиально-симметричной сверхрешетки [9,10] с нанорадиальным периодом).

В работе [11], в частности, показано, что электрон-фононное взаимодействие в полном полупроводниковом цилиндре $A^{III}B^V$ при учете кристаллической структуры образца и пьезоэлектрических эффектов, радикальным образом отличается от того же взаимодействия в

углеродной нанотрубке [12]. В ряде работ рассмотрены также особенности электронного транспорта [13-15], магнитных свойств [1,16,17] электронной подсистемы в цилиндрических нанотрубках и влияние электрического и магнитного полей на энергию водородоподобной связи в коаксиальной двухслойной квантовой нити с участием донорной примеси [18].

В настоящей работе теоретически рассчитан энергетический спектр носителей заряда в квантованном “одиночном” цилиндрическом слое, а также рассмотрена специфика оптического поглощения при дипольных и квадрупольных межзонных и внутризонных-межподзонных переходах в слое.

2. Общие допущения

Рассматриваемую систему предполагаем бесконечной вдоль оси симметрии (z), а в радиальном направлении (r) слой аппроксимируем бесконечно глубокой потенциальной ямой, “свернутой в трубку”:

$$U(r) = \begin{cases} 0; & R_1 < r < R_2, \\ \infty; & r \leq R_1, \quad r \geq R_2, \end{cases} \quad (1)$$

где R_1 и R_2 – соответственно, внутренний и внешний радиусы слоя. Выбор модели квантовой ямы для слоя в виде (1) будет физически адекватным для случаев, когда рассматриваемая система в поперечном направлении представляет собой композицию вакуум/слой/вакуум или же кор/слой/среда. Во втором случае кор и среда должны быть из одного и того же материала и между энергетическими характеристиками контактирующих материалов должны выполняться определенные соотношения, а именно: материал слоя по сравнению с материалом кора(среды) должен быть более узкозонным, их запрещенные зоны должны перекрываться, а величина разрыва зонной энергии, отсчитанной от вакуумного уровня, для контактирующих материалов на интерфейсе должна быть много больше энергии размерного квантования носителей заряда в слое. Кроме того, предполагается, что в пределах слоя для носителей заряда имеет место режим “сильного” квантования, для чего необходимо выполнение условия

$$L^2 \ll a_L^2, \quad (2)$$

где $L = R_2 - R_1$ – толщина слоя, a_L – боровский радиус объемного экситона в материале слоя. В плане совокупного выполнения приведенных условий для случая композиции кор/слой/среда типичными можно считать, в частности, структуры CdS/HgS/CdS, CdSe/ZnS/CdSe, CdS/PbS/CdS (см., например, работы [19-21]).

Рассмотрим теперь одночастичные состояния в слое при различных соотношениях между толщиной и радиусами слоя.

3. Одноэлектронные состояния в слое

3.1. Слой “большого” радиуса

Предположим, что слой достаточно “удален” от оси симметрии, т.е., наряду с вышеприведенными условиями имеет место также и условие

$$L^2 \ll R_1^2, R_2^2. \quad (3)$$

С энергетической точки зрения это равнозначно условию малости энергии вращения частицы в слое по сравнению с ее энергией размерного квантования в радиальном направлении. Из чисто качественных соображений нетрудно выяснить, что между эффективными периодами движения единичного цикла радиального (T_{conf}) и вращательного (T_{rot}) движений при этом будет иметь место следующее соотношение:

$$\frac{T_{conf}}{T_{rot}} \sim \frac{L^2}{R_{1,2}^2} \ll 1. \quad (4)$$

Иначе говоря, при выполнении условия (3) вращательное движение частицы является “медленным” по сравнению с ее радиальным движением, что дает нам возможность для решения соответствующего уравнения Шредингера воспользоваться адиабатическим приближением.

В цилиндрических координатах (r, φ, z) имеем следующее уравнение Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{\partial^2 \psi(r, \varphi)}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \psi(r, \varphi)}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi(r, \varphi)}{\partial \varphi^2} \right] = E \psi(r, \varphi), \quad (5)$$

где μ – изотропная эффективная масса, E – полная энергия движения частицы в плоскости (r, φ). Выделив из (5) часть, соответствующую “быстрому” (радиальному) движению, для радиальной огибающей волновой функции $\phi(r)$ получим следующее уравнение:

$$\frac{d^2 \phi}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} + \frac{2\mu}{\hbar^2} E_{conf} \phi = 0; \quad \left(\int_{R_1}^{R_2} |\phi(r)|^2 r dr = 1 \right) \quad (6)$$

с граничными условиями

$$\phi(r = R_1) = \phi(r = R_2) = 0. \quad (7)$$

Решением этого уравнения является линейная комбинация функций Бесселя ($J_0(\alpha x)$) и Неймана ($N_0(\alpha x)$) нулевого порядка [22]

$$\phi(x) = C_1 J_0(\alpha x) + C_2 N_0(\alpha x), \quad (8)$$

где $x = r/L$, $\alpha^2 = (2\mu L^2 / \hbar^2) E_{conf}$, а C_1, C_2 – нормировочные константы. Учитывая теперь условие (3) и воспользовавшись асимптотическим разложением функций из (8) для больших значений аргумента [22], вместо (8) можем записать:

$$\phi(x) \equiv \frac{1}{\sqrt{x}} \left[C_1 \cos\left(\alpha x - \frac{\pi}{4}\right) + C_2 \sin\left(\alpha x - \frac{\pi}{4}\right) \right]. \quad (9)$$

Учет граничных условий (7) приводит для собственных функций и собственных значений уравнения (6) к следующим результатам:

$$\phi(r) \equiv \phi_n(r) = \sqrt{\frac{2}{L}} \frac{\sin \frac{\pi n}{L} (r - R_1)}{\sqrt{r}}; \quad (n = 1, 2, \dots), \quad (10)$$

$$E_{conf} \equiv E_n = \frac{\hbar^2 \alpha_n^2}{2\mu L^2} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2\mu L^2}. \quad (11)$$

Усредняя теперь величину r^{-2} по состояниям (10), для “медленной” части движения частицы (вращения) приходим к уравнению двумерного ротатора

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu R_n^2} \frac{d^2 f(\varphi)}{d\varphi^2} = E_{rot} f(\varphi); \quad E_{rot} \equiv E_{m,n} = \frac{\hbar^2 m^2}{2\mu R_n^2}; \quad f(\varphi) = \frac{e^{im|\varphi}}{\sqrt{2\pi}}; \quad (m = \pm 1, \pm 2, \dots), \quad (12)$$

для эффективного радиуса вращения которого (R_n) с учетом условия (3) получаем

$$R_n^{-2} \equiv R_1^{-2} \left[1 - \frac{L}{R_1} + \frac{L^2}{R_1^2} \left(1 - \frac{3}{2\pi^2 n^2} \right) \right]. \quad (13)$$

Окончательно, для полной волновой функции и энергетического спектра поперечного движения частицы в слое “большого” радиуса можем записать:

$$\Psi(r, \varphi) \equiv \Psi_{n,m}(r, \varphi) = \phi_n(r) f_m(\varphi) = \sqrt{\frac{2}{L}} \frac{\sin \frac{\pi n}{L} (r - R_1)}{\sqrt{r}} \frac{e^{im|\varphi}}{\sqrt{2\pi}}, \quad (14)$$

$$E = E_{conf} + E_{rot} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2\mu L^2} + \frac{\hbar^2 m^2}{2\mu R_1^2} \left[1 - \frac{L}{R_1} + \frac{L^2}{R_1^2} \left(1 - \frac{3}{2\pi^2 n^2} \right) \right] \equiv \varepsilon_1 n^2 + \frac{\hbar^2 m^2}{2\mu R_n^2}. \quad (15)$$

3.2. Слой “умеренного” радиуса

Предположим теперь, что соотношение между L и R_1 такое, что малой величиной по первому порядку является отношение

$$\frac{L^3}{R_1^3} \ll 1. \quad (16)$$

Для решения уравнения (5) теперь поступаем следующим образом: ищем $\Psi(r, \varphi)$ в виде

$$\Psi(r, \varphi) = \frac{\chi(r)}{\sqrt{r}} \frac{e^{im|\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \quad (17)$$

и после подстановки (17) в (5), переходя к переменной $\rho = r - R_1$, приходим к уравнению

$$\frac{d^2\chi(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - \frac{\hbar^2 \left(m^2 - \frac{1}{4} \right)}{2\mu(\rho + R_1)^2} \right] \chi(\rho) = 0. \quad (18)$$

Учитывая условие (16), проведем в (18) разложение центробежной энергии по степеням ρ/R_1 с точностью до членов порядка L^3/R_1^3 включительно. После этого уравнение (18) принимает вид

$$\frac{d^2\chi(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E^{(0)} + F_m\rho) \chi(\rho) = 0, \quad (19)$$

где обозначено: $E^{(0)} = E - \frac{\hbar^2 \left(m^2 - \frac{1}{4} \right)}{2\mu R_1^2}$, $F_m = \frac{\hbar^2 \left(1 - \frac{1}{4} \right)}{\mu R_1^3}$.

Величина $V = -F_m\rho$, согласно (16), здесь представляет собой малое возмущение по отношению к энергии $E^{(0)}$. Для $E^{(0)}$ и соответствующей невозмущенной радиальной функции $\chi^{(0)}(\rho)$ получаем из (19):

$$E^{(0)} = \varepsilon_1 n^2; \quad \chi_n^{(0)}(\rho) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi n}{L} \rho. \quad (20)$$

Поправка первого порядка к энергии вычисляется элементарно:

$$\Delta E^{(1)} = V_{n,n} = -\frac{F_m L}{2} = -\frac{\hbar^2 \left(m^2 - \frac{1}{4} \right) L}{2\mu R_1^3}. \quad (21)$$

Воспользовавшись общей формулой [23]

$$\Delta E_k^{(2)} = \sum_{k \neq k'} \frac{|V_{kk'}|^2}{E_k^{(0)} - E_{k'}^{(0)}}$$

для поправки второго порядка, в нашем случае приходим к выражению

$$\Delta E^{(2)} = -\frac{(4F_m L)^2 n^2}{\pi^4 \varepsilon_1} \sum_{n \neq n'} \frac{\left[1 - (-1)^{n \pm n'} \right]^2 (n')^2}{\left[(n')^2 - n^2 \right]^5}. \quad (22)$$

Применяя к (22) табличную формулу суммирования [24]

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2k+1)^2}{\left[(2k+1)^2 - a^2 \right]^3} = \frac{\pi}{32a^3} \tan \frac{\pi a}{2} + \frac{\pi^2}{64a^2} \left(1 + \pi a \tan \frac{\pi a}{2} \right) \left(\sec \frac{\pi a}{2} \right)^2 \quad (23)$$

для четных и нечетных n' и проведя в ней двукратное дифференцирование по “параметру” n , для $\Delta E^{(2)}$ получаем

$$\Delta E^{(2)} \equiv \Delta E_{n,m}^{(2)} = \frac{(F_m L)^2}{48 \varepsilon_1 n^2} \left(1 - \frac{15}{\pi^2 n^2} \right). \quad (24)$$

Для полной энергии поперечного движения частицы в рассмотренном приближении теперь можем записать

$$E = \varepsilon_1 n^2 + \frac{\hbar^2 \left(m^2 - \frac{1}{4} \right)}{2\mu R_1^2} + \Delta E^{(1)} + \Delta E^{(2)}. \quad (25)$$

При расчете возмущенной части волновой функции общая формула

$$\chi_k^{(1)} = \sum_{k \neq k'} \frac{V_{k,k'} \chi_{k'}^{(0)}}{E_k^{(0)} - E_{k'}^{(0)}}$$

для рассматриваемого случая принимает вид

$$\chi_n^{(1)}(\rho) = \sqrt{\frac{2}{L}} \frac{4F_m L n}{\pi^2 \varepsilon_1} \sum_{n \neq n'} \frac{\left[1 - (-1)^{n \pm n'} \right] n'}{\left[(n')^2 - n^2 \right]^3} \sin \frac{\pi n'}{L} \rho. \quad (26)$$

Применяя к (26) табличную формулу суммирования [24]

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{k \sin kx}{(k^2 - a^2)^2} = \frac{\pi^2}{4a} \sin ax \csc^2 \pi a - \frac{\pi x}{4a} \cos(\pi a - xa) \csc \pi a$$

с однократным дифференцированием по параметру, получаем для возмущенной части радиальной волновой функции

$$\chi_n^{(1)}(\rho) = \sqrt{\frac{2}{L}} \frac{F_m L}{4\varepsilon_1 n^2} \left[\frac{\pi n}{L} \rho \left(\frac{\rho}{L} - 1 \right) \cos \frac{\pi n}{L} \rho + \left(\frac{1}{2} - \frac{\rho}{L} \right) \sin \frac{\pi n}{L} \rho \right]. \quad (27)$$

С чисто методической точки зрения отметим также, что результаты (25) и (27) можно получить, если решения уравнения (19) искать в виде линейной комбинации функций Эйри первого и второго рода с последующим их асимптотическим разложением с учетом условия (16).

Рассмотрим теперь оптические переходы для рассмотренных выше случаев.

4. Оптическое поглощение в слое

Предположим, что падающая на цилиндрический слой световая волна $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{e} A_0 \exp i(\Omega t - \mathbf{q}\mathbf{r}) + \text{к.с.}$ с амплитудой A_0 , частотой Ω , волновым вектором \mathbf{q} и единичным вектором поляризации \mathbf{e} направлена вдоль оси y и поляризована линейно вдоль оси x : $\mathbf{q} = \mathbf{q}(0, q, 0)$, $\mathbf{e} = \mathbf{e}(1, 0, 0)$.

Соответствующее возмущение, связанное со слабой волной, представим, как обычно [25], в виде

$$A = \frac{i\hbar|e|}{m_0c}(\mathbf{A}\mathbf{P}), \quad (28)$$

где \mathbf{P} – трехмерный оператор импульса, m_0 – масса свободного электрона, e – его заряд, c – скорость света в вакууме. Переходя в (28) к цилиндрическим координатам и используя полученные выше результаты, для полосы оптического поглощения в слое получаем следующую картину.

4.1. Случай “большого” радиуса

При расчетах в этом разделе пользуемся волновыми функциями и спектром из (14) и (15).

4.1.1. Межзонные дипольные переходы

Для матричного элемента $M_{c,v}^D$ переходов $|n_v, m_v\rangle \rightarrow |n_c, m_c\rangle$ получаем:

$$M_{c,v}^D = D_{c,v} \delta_{n_c, n_v} \delta_{m_c, m_v}, \quad (29)$$

где $D_{c,v}$ – матричный элемент дипольной “части” оператора (28), построенный на блоховских амплитудах зоны проводимости (c) и валентной зоны (v), $\delta_{n,m}$ – символ Кронекера.

4.1.2. Межзонные квадрупольные переходы

Соответствующий матричный элемент $M_{c,v}^Q$ теперь имеет вид

$$M_{c,v}^Q = Q_{c,v} \delta_{n_c, n_v} \delta_{m_c, m_v}, \quad (30)$$

где $Q_{c,v}$ – матричный элемент квадрупольной “части” оператора (28), построенный на блоховских амплитудах v - и c -зон. Пороговая частота для переходов (29) и (30) будет одной и той же:

$$\hbar\omega_{c,v} = E_g^L + \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2\mu_{c,v} L^2} + \frac{\hbar^2 m^2}{2\mu_{c,v} R_n^2}, \quad (31)$$

где $\mu_{c,v}^{-1} = \mu_c^{-1} + \mu_v^{-1}$, $n_c = n_v \equiv n$, $m_c = m_v \equiv m$, а E_g^L – ширина запрещенной зоны массивного образца из материала слоя.

Частотная зависимость коэффициента поглощения $\gamma_{c,v}(\omega)$ в обоих случаях будет определяться ходом кривой, характерной для поглощения в 1D-системах [26,27]:

$$\gamma_{c,v}(\Omega) \sim \sum_{c,v} |M_{c,v}|^2 (\hbar\Omega - \hbar\omega_{c,v})^{-\frac{1}{2}} \Theta(\hbar\Omega - \hbar\omega_{c,v}), \quad (32)$$

где $\Theta(x)$ – ступенчатая функция Хевисайда, а под $M_{c,v}$ подразумеваются матричные элементы (29) и (30) для соответствующих случаев.

4.1.3. Внутризонные дипольные переходы

Для матричного элемента $M_{f,i}^D$ переходов между начальным $|n_i, m_i\rangle$ и конечным $|n_f, m_f\rangle$ состояниями внутри одной и той же “одномерной” зоны теперь имеем:

$$M_{n,n}^D = \pm i\hbar \frac{|e|A_0}{4m_0cL} (2|m|\pm 1) \ln \frac{R_2}{R_1} \delta_{|m_f|, |m_i|\pm 1}; \quad (m \equiv m_i) \quad (33)$$

с правилами отбора $n_f = n_i \equiv n$, $|m_f| = |m_i| \pm 1$ и пороговой частотой

$$\hbar\omega_{n,n}^{\pm} = \frac{\hbar^2 (2|m|\pm 1)}{2\mu R_n^2}, \quad (34)$$

$$M_{n_f, n_i}^D = \mp i\hbar \frac{|e|A_0}{4m_0cL} \frac{8n_f n_i}{n_f^2 - n_i^2} \left[1 \mp (2|m|\pm 1) \frac{L^2}{R_1^2} \frac{1}{\pi^2 (n_f^2 - n_i^2)} \right] \quad (35)$$

с правилами отбора $|m_f| = |m_i| \pm 1$, $n_f \pm n_i$ – нечетное, и пороговой частотой

$$\hbar\omega_{f,i} = \frac{\pi^2 \hbar^2 (n_f^2 - n_i^2)}{2\mu L^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{(|m|\pm 1)^2}{R_{n_f}^2} - \frac{m^2}{R_{n_i}^2} \right]. \quad (36)$$

4.1.4. Внутризонные квадрупольные переходы

Для матричного элемента $M_{f,i}^Q$ получаем

$$M_{n,n}^Q = i\hbar \frac{|e|(qL)A_0}{4m_0cL} (|m|\pm 1) \delta_{|m_f|, |m_i|\pm 2} \quad (37)$$

с правилами отбора $n_f = n_i \equiv n$, $|m_f| = |m_i| \pm 2$, ($m_i \equiv m$) и пороговой частотой

$$\hbar\omega_{n,n} = \frac{2\hbar^2 (|m|\pm 1)}{\mu R_n^2}, \quad (38)$$

$$M_{n_f, n_i}^Q = \mp \hbar \frac{|e|(qR_1)A_0}{m_0 c L} \frac{n_f n_i}{n_f^2 - n_i^2} \delta_{|m_f|, |m_i| \pm 2} \begin{cases} 1 + \frac{L}{2R_1}; & n_f \pm n_i = 2k + 1, \\ \left(-\frac{L}{2R_1} \right); & n_f \pm n_i = 2k; (k = 0, 1, \dots) \end{cases} \quad (39)$$

с приведенными в (39) правилами отбора и пороговой частотой

$$\hbar\omega_{f,i} = \frac{\pi^2 \hbar^2 (n_f^2 - n_i^2)}{2\mu L^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{(|m| \pm 2)^2}{R_{n_f}^2} - \frac{m^2}{R_{n_i}^2} \right]. \quad (40)$$

4.2. Случай “умеренного” радиуса

В этом разделе будут использованы спектр и волновые функции (25), (27).

4.2.1. Межзонные переходы

В силу ортогональности функций $\chi^{(0)}(\rho)$ и $\chi^{(1)}(\rho)$ и с учетом условия (16), матричные элементы межзонных переходов в этом случае имеют тот же вид, что и в (29), (30). Меняется только значение пороговой частоты. Вместо (31) теперь имеем

$$\hbar\omega_{c,v} = E_g^L + \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2\mu_{c,v} L^2} + \frac{\hbar^2 \left(m^2 - \frac{1}{4} \right)}{2\mu_{c,v} R_1^2} - \frac{1}{2} (F_m^c L + F_m^v L) + \frac{1 - \frac{15}{\pi^2 n^2}}{48n^2} \left[\frac{(F_m^c L)^2}{\epsilon_{1c}} + \frac{(F_m^v L)^2}{\epsilon_{1v}} \right], \quad (41)$$

где индексы c и v относятся к значениям величин F_m и ϵ_1 соответственно в зоне проводимости и в валентной зоне.

4.2.2. Внутризонные дипольные переходы

Расчеты для внутризонных дипольных переходов показывают, что при условии (16) соответствующий матричный элемент переходов $n_f = n_i \equiv n$ имеет то же самое значение, что и в (33), и с теми же правилами отбора. А для соответствующей пороговой частоты вместо (34) получаем:

$$\hbar\omega_{n,n}^{\pm} = \pm \frac{\hbar^2 (2|m| \pm 1)}{2\mu R_1^2} + \frac{1}{2} (F_m L - F_{m \pm 1} L) + \frac{1}{48\epsilon_1 n^2} \left(1 - \frac{15}{\pi^2 n^2} \right) \left[(F_{m \pm 1} L)^2 - (F_m L)^2 \right]. \quad (42)$$

Для матричного элемента дипольных переходов при $n_f \neq n_i$ теперь имеем вместо (35):

$$M_{n_f, n_i}^D = \mp i \hbar \frac{|e| A_0}{4m_0 c L} \frac{8n_f n_i}{n_f^2 - n_i^2} \left[1 \mp (2|m| \pm 1) \frac{L^2}{R_1^2} \frac{1}{\pi^2 (n_f^2 - n_i^2)} \left(1 - \frac{L}{R_1} \right) \right] \quad (43)$$

с правилами отбора $|m_f| = |m_i| \pm 1$, ($m_i \equiv m$), $n_f \pm n_i$ нечетное и пороговой частотой

$$\hbar\omega_{f,i} = \varepsilon_1 \left(n_f^2 - n_i^2 \right) \pm \frac{\hbar^2 (2|m|\pm 1)}{2\mu R_1^2} + \Delta E_f^{(1)} + \Delta E_f^{(2)} - \Delta E_i^{(1)} - \Delta E_i^{(2)}. \quad (44)$$

4.2.3. Внутризонные квадрупольные переходы

При квадрупольных переходах $n_f = n_i \equiv n$ матричный элемент имеет вид

$$M_{n,n}^Q = i\hbar \frac{|e|(qL)A_0}{4m_0cL} \left[(|m|\pm 1) \pm \frac{R_1}{L} \left(\frac{\pi^2 n^2}{6} - 1 \right) (f_{n,m_f} - f_{n,m_i}) \right] \delta_{|m_f|, |m_i|\pm 2}; \quad \left(f_{n,m} = \frac{F_m L}{4\varepsilon_1 n^2} \right) \quad (45) \quad c$$

пороговой частотой

$$\hbar\omega_{n,n} = \frac{2\hbar^2 (|m|\pm 1)}{\mu R_1^2} + \frac{1}{2} (F_m L - F_{m\pm 2} L) + \Delta E_{n,m\pm 2}^{(2)} - \Delta E_{n,m}^{(2)}. \quad (46)$$

Для переходов $n_f \neq n_i$ приходим к следующим результатам: при переходах $n_f \pm n_i$ нечетное, для матричного элемента повторяется выражение (39) при пороговой частоте

$$\hbar\omega_{f,i} = \varepsilon_1 \left(n_f^2 - n_i^2 \right) + \frac{\hbar^2}{2\mu R_1^2} \left[(|m|\pm 2)^2 - m^2 \right] + \frac{1}{2} (F_{n_f, |m|\pm 2} L - F_{n_i, |m|} L) + \Delta E_{n_f, |m|\pm 2}^{(2)} - \Delta E_{n_i, |m|}^{(2)}, \quad (47)$$

а при переходах $n_f \pm n_i$ четное, для матричного элемента получаем выражение

$$M_{n_f, n_i}^Q = i\hbar \frac{|e|(qR_1)A_0}{m_0cL} \frac{n_f n_i}{n_f^2 - n_i^2} \left[\frac{L}{R_1} + 2 \frac{f_{n_f, |m|\pm 2} (3n_f^2 + n_i^2) - f_{n_i, |m|} (3n_i^2 + n_f^2)}{n_f^2 - n_i^2} \right] \delta_{|m_f|, |m_i|\pm 2} \quad (48)$$

с той же пороговой частотой (47).

5. Заключение

Относительно результатов, полученных в работе, можно заключить следующее:

1. В полученных выражениях для энергии и волновых функций адекватным образом отображается факт корреляции движения носителей заряда по радиальному и ротационному направлениям, обусловленной ко-нечностью толщины слоя.

2. При межзонных (дипольных и квадрупольных) переходах в выражении для пороговой частоты наглядно “комбинируются” параметры, характерные как для “чисто пленочных” переходов, так и для переходов в модели жесткого двумерного ротатора.

3. Существенно, что различие между физическими ситуациями для случаев “большого” и “умеренного” радиусов приводит к тому, что при внутризонных (дипольных и квадрупольных) переходах для этих случаев различными оказываются как пороговые частоты, так и интенсивности оп-тических переходов.

4. Отмеченные оптические характеристики рассмотренной системы определяются геометрическими размерами образца и соотношениями между ними.

Работа выполнена в рамках государственной целевой программы Рес-публики Армения “Полупроводниковая наноэлектроника”.

ЛИТЕРАТУРА

1. **А.А.Григорькин, С.М.Дунавский.** ФТТ, **50**, 507 (2008).
2. **А.А.Григорькин, С.М.Дунавский.** ФТТ, **49**, 557 (2007).
3. **Н.Аjiki, Т.Аndo.** J. Phys. Soc. Jap., **628**, 1255 (1993), **Т.Аndo.** Semicond. Sci. Technol. **15**, R13 (2000).
4. **J.Appenzeller, J.Knoch, M.Radosavljevic, P.Avoiris.** Phys. Rev. Lett., **92**, 226802 (2004).
5. **В.М.Осадчий, В.Я.Принц.** Письма в ЖЭТФ, **72**, 451 (1998), **V.Ya.Prinz, V.A.Se-leznev, А.К.Gutakovsky.** The Physics of Semiconductors. World Scientific, 1999.
6. **V.Ya.Prinz, V.A.Seleznev, А.К.Gutakovsky, et al.** Physica E, **6**, 828 (2000).
7. **V.Ya.Prinz.** Microelectron. Eng., **69**, 466 (2003).
8. **V.Ya.Prinz.** Physica E, **24**, 54 (2004), **А.В.Vorob'ev, V.Ya.Prinz, et al.** Photonics Spectra, **23**, 171 (2004).
9. **Н.В.Ткач, И.В.Пронишин, А.М.Маханец.** ФТТ, **40**, 557 (1998).
10. **Н.В.Ткач, В.А.Головацкий.** ФТТ, **43**, 350 (2001).
11. **А.И.Ведерников, А.В.Чаплик.** ФТП, **38**, 1358 (2004).
12. **Н.Suzuura, Т.Аndo.** Phys. Rev. B, **65**, 235412 (2002).
13. **Л.И.Магарилл, Д.А.Романов, А.В.Чаплик.** ЖЭТФ, **113**, 1411 (1998).
14. **Л.И.Магарилл, А.В.Чаплик.** ЖЭТФ, **115**, 1478 (1999).
15. **А.В.Чаплик.** Pis'ma v ZhETF, **80**, 140 (2004).
16. **V.A.Margulis, М.А.Рyатаev.** Phys. Rev. B, **72**, 075312 (2005).
17. **И.И.Чугаев, В.А.Маргулис, А.В.Шорохов, С.Е.Холодова.** ФТТ, **41**, 856 (1999).
18. **Sr.G.Jayam, К.Navaneethakrishnan.** Sol. State Commun., **122**, 433 (2002).
19. **V.A.Harutyunyan.** Physica E, **39**, 37 (2007).
20. **J.W.Haus et al.,** Phys. Rev. B, **47**, 1359 (1993).
21. **D.Schooss, А.Мews, et al.** Phys. Rev. B, **49**, 17072 (1994).
22. Справочник по специальным функциям (ред. **М.Абрамовиц, И.Стиган**). М., Наука, 1979.
23. **Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц.** Квантовая механика (нерелятивистская теория). М., Наука, 1974.
24. **А.П.Прудников, Ю.А.Брычков, О.И.Маричев.** Интегралы и ряды, т.1. М., Наука, 1981.
25. **Н.Haug, S.W.Koch.** Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors. Singapore, World Scientific, 1994.
26. **P.Harrison.** Quantum Wells, Quantum Wires, and Quantum Dots. New York, Wiley, 2000.
27. **V.A. Harutyunyan, Е.М. Kazaryan, А.А. Kostanyan, Н.А. Sarkisyan.** Physica E, **36**, 114 (2007).

Օպտիկական կլանումը կիսահաղորդչային նանոգլանային շերտում

Ուժեղ քվանտացման պայմաններում, լիցքակիրների իզոտրոպ արդյունաբար զանգվածի մոտավորությամբ դիտարկված են լիցքակիրների վիճակները կիսահաղորդչային գլանային շերտում: Կախված գլանային շերտի հաստության և շառավղի մեծությունների հարա-բերակցությունից “մեծ”, և “չափավոր” շառավղիների դեպքեր) ստացված են լիցքակիրների էներգիական սպեկտրի և պարուրող ալիքային ֆունկցիաների բացահայտ տեսքը: Նշված դեպքերի համար հաշվարկված են նաև դիպոլային և քվադրուպոլային օպտիկական անցումներին համապատասխանող կլանման բնութագրիչները:

OPTICAL ABSORPTION IN A SEMICONDUCTOR CYLINDRICAL NANOLAYER

V.A. HARUTYUNYAN, S.L. HARUTYUNYAN, G.H. DEMIRJAN, N.H. GASPARYAN

In the isotropic effective-mass approximation we consider the single-particle states in a semiconductor cylindrical nanolayer when the “strong quantization regime” takes place in the layer. The explicit form of the energy spectrum and envelope wave functions of single-electron states in the layer is obtained in the cases of “large” and “moderate” radii of the system. The corresponding characteristics of dipole and quadrupole optical transitions are calculated.

УДК 621.382

ДЕЙСТВИЕ РАЗЛИЧНЫХ ВИДОВ ОБЛУЧЕНИЯ НА ПАРАМЕТРЫ КРЕМНИЕВЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПРИБОРОВ

В.А. СААКЯН

Национальный институт метрологии РА, Ереван, Армения

(Поступила в редакцию 25 декабря 2007 г.)

Исследовано влияние различного вида облучения (электроны, нейтроны, протоны, гамма) на основные свойства кремниевых полупроводниковых приборов. Больше внимание уделено транзисторам как наименее радиационно стойким структурам. Показано, что при протонном облучении изменение соответствующих параметров происходит при сравнительно меньших дозах облучения. Результаты объяснены на основе возникновения поверхностных каналов проводимости при облучении.

Развитие ядерной энергетики и космических исследований стимулирует углубленное изучение свойств полупроводниковых приборов в условиях действия различных корпускулярных и электромагнитных излучений. Это объясняется тем, что именно полупроводниковые приборы, особенно кремниевые, по своим параметрам, габаритам и надежности наиболее пригодны для работы в указанных условиях [1-5]. Анализ работ, выполненных с применением полупроводниковых приборов радиоэлектронной аппаратуры в условиях воздействия на нее ядерных излучений, свидетельствует о том, что в подавляющем большинстве случаев отказы в ее функционировании наступают в результате существенных изменений параметров транзисторов: ни один из характерных для них параметров не остается при этом неизменным. Так, например, пропорционально интегральному потоку быстрых нейтронов возрастают входное сопротивление и коэффициент обратной связи транзисторов в схеме включения с общей базой [6].

Однако изучение влияния радиации на конкретные параметры полупроводниковых приборов наталкивается на серьезные трудности. Даже два совершенно идентичных по типу транзистора могут вести себя по-разному в условиях воздействия радиации. На их поведение накладывает отпечаток технологический процесс изготовления приборов и методика проведения эксперимента. Тем не менее можно рассмотреть процесс с разделением влияния поверхностных и объемных эффектов на поведение приборов в условиях облучения. Преобладающим эффектом при облучении является возникновение каналов на поверхности приборов, которые приводят к изменению характеристик.

Вообще говоря, поверхностные эффекты начинают проявлять себя уже при дозах

порядка 10^3 рад, в то время как объемные эффекты проявляются только при дозах порядка 10^7 рад. Наиболее чувствительными к облучению параметрами являются обратный ток утечки для диодов, а для транзисторов – $I_{\text{ко}}$ и B . Эти параметры в условиях воздействия радиации обычно ухудшаются. В некоторых частных случаях может наблюдаться их улучшение. Для диодов токи утечки при облучении могут увеличиваться на несколько порядков. С ростом дозы облучения ток или все время растет, или стремится к насыщению. Обратный ток коллекторного перехода транзистора $I_{\text{ко}}$ изменяется аналогичным образом. Статический коэффициент усиления по току транзисторов $B_{\text{ст}}$ обычно уменьшается с ростом дозы облучения и при значительных дозах может быть меньше единицы.

Одной из самых чувствительных к действию проникающего излучения характеристик полупроводников является время жизни неосновных носителей заряда, определяющее работу основных полупроводниковых приборов. Как правило, оно изменяется в несколько раз при дозах облучения, при которых изменения других характеристик, например, удельной проводимости, оказываются малыми. В таких условиях зависимость времени жизни от интегрального потока излучения (можно описать простым соотношением

$$1/\tau = 1/\tau_0 + K\Phi, \quad (1)$$

экспериментально проверенным в широком диапазоне возможных величин τ . В этом соотношении τ_0 – начальное время жизни, а K – коэффициент пропорциональности, определяющий скорость изменения времени жизни при облучении. В дальнейшем его будем называть коэффициентом радиационного изменения времени жизни. Он по сути определяет степень радиационной деградации приборов.

Величина коэффициента K определяется многими факторами, в том числе, скоростью введения рекомбинационных центров в запрещенную зону, их рекомбинационными свойствами (например, сечениями захвата ими электронов и дырок), а также их эффективностью – иначе говоря, уровнем заполнения их электронами, зависящим от положения уровня Ферми по отношению к энергетическим уровням этих центров. Математически коэффициент K может быть в общем случае выражен следующей формулой [6]:

$$K = [N_A \sigma_d(E) v(E)] \sum \eta_i (\sigma_{pi} v_p f_{ni} + \sigma_{ni} v_n f_{pi}). \quad (2)$$

Произведение, заключенное в этой формуле в квадратные скобки, представляет собой не что иное, как скорость введения структурных дефектов на единицу количества воздействующего излучения. Она зависит как от вида излучения, так и от его энергетического состава. Произведение, стоящее под знаком суммы, определяет, в конечном итоге, рекомбинационные свойства и эффективность того или иного центра, образовавшегося в результате появления в кристаллической решетке структурного дефекта. В этом произведении η_i – скорость введения i -ого центра; σ_{pi} , σ_{ni} – сечение захвата дырки или электрона этим центром; v_{pi} , v_{ni} – средняя тепловая скорость дырки и электрона, и, наконец, f_{pi} , f_{ni} – функции, зависящие от положения уровня Ферми по отношению к энергетическому уровню i -ых центров; они определяют степень заполнения центров электронами и дырками.

Несмотря на то, что при облучении в запрещенную зону вводится целая система уровней [7,8], время жизни в облученном полупроводнике, как показывают эксперименты, определяется лишь одним-двумя доминирующими центрами. Экспериментально коэффициент K может быть определен из данных по измерению времени жизни неосновных носителей в образцах материала, подвергающегося облучению. Однако, его величина может быть определена и из результатов облучения полупроводниковых приборов. В случае транзисторов, например, ее можно вычислить из данных по скорости изменения обратной величины коэффициента передачи тока базы, если известно время переноса инжектированных носителей через область базы:

$$K = 1/t_{\text{пер}} [d(1/B)/d\Phi] \quad (3)$$

Простота техники эксперимента, возможность дистанционного измерения в процессе облучения и получение большой статистики определяют преимущества использования приборов для измерения времени жизни неосновных носителей заряда в полупроводниковом материале – важного параметра, определяющего также степень радиационной стойкости полупроводниковых приборов.

При изучении радиационных изменений параметров приборов оказывается удобным оперировать не абсолютными величинами α , $(1-\alpha)$ или B , а их относительными значениями, приведенными к исходным, т.е. α_{Φ}/α_0 , $(1-\alpha_{\Phi})/(1-\alpha_0)$ и B_{Φ}/B_0 . Здесь и далее индексом Φ обозначены параметры транзисторов и других полупроводниковых приборов, достигаемые в процессе облучения или после него, а индексом 0 – начальные.

На рис.1 представлена вольт-амперная характеристика силовых диодов до и после облучения электронами с энергией 50 МэВ дозами 10^{14} эл/см² и 10^{15} эл/см². Это типичное поведение диодов при облучении – ухудшение выпрямительных свойств, т.е. кремниевый материал по электрическим свойствам приобретает более линейный характер. Радиационные изменения соответствующих параметров полупроводниковых приборов приведены на рис.2-4 и в табл.1. Видно, что эти параметры с увеличением дозы облучения ухудшаются, поэтому представляется важным оптимальный выбор дозы облучения для рекомендации их применения. В случае протонного облучения радиационные изменения происходят при более низких дозах радиации, что обусловлено большой массой протона по сравнению с электроном с одинаковым зарядом. В то же время нейтрон, не имея заряда, несмотря на почти одинаковую с протоном массу, имеет большую проникающую способность и большой объемный эффект. Поскольку радиационные изменения в основном определяются поверхностными явлениями, то протонное облучение оказывает большее деградирующее влияние на полупроводниковые приборы, а гамма-облучение – наоборот. Следовательно, для радиационной стойкости полупроводниковых приборов необходимо учесть не только тип материала и его проводимость (см. рис.2), но и вид облучения.

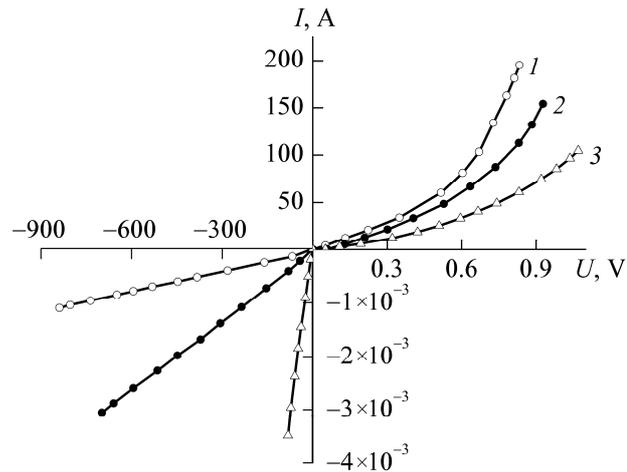


Рис.1. Вольт-амперная характеристика силовых полупроводниковых диодов до (1) и после облучения электронами с энергией 50 МэВ дозами 10^{14} эл/см² (2), 10^{15} эл/см² (3).

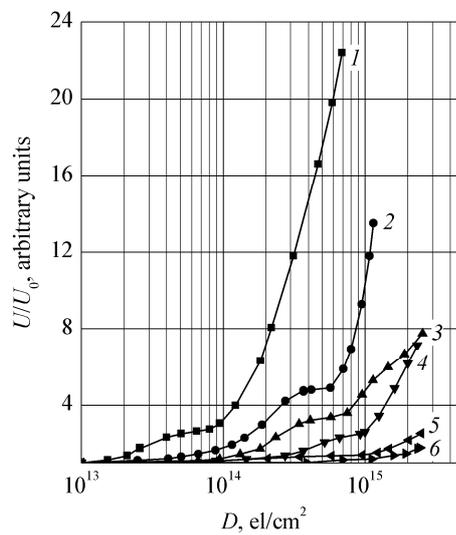


Рис.2. Зависимость относительного изменения прямого напряжения кремниевых диодов от дозы облучения электронами с энергией 50 МэВ с различными удельными сопротивлениями базового материала: 1 – 35 ом см, 2 – 15 ом см; 3 – 10 ом см; 4 – 5 ом см; 5 – 1 ом см; 6 – 0,4 ом см.

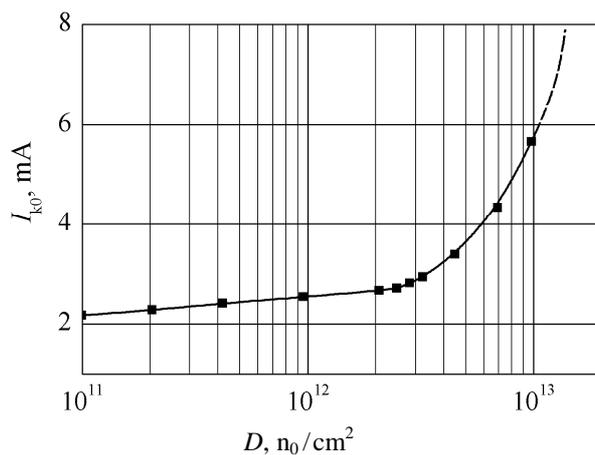


Рис.3. Зависимость обратного тока коллектора силовых транзисторов от дозы нейтронного облучения.

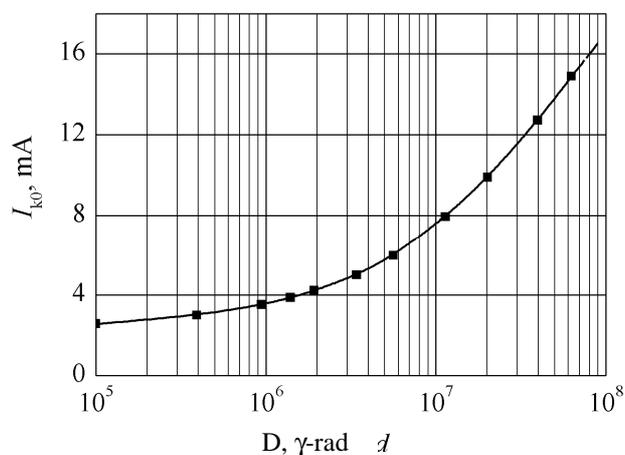


Рис.4. Зависимость обратного тока коллектора силовых транзисторов от дозы гамма-облучения.

Физические причины полученных результатов можно объяснить следующим образом. Поверхность полупроводникового прибора всегда покрыта слоями окиси, в результате чего плотность медленных акцепторных состояний на поверхности велика. В сухой атмосфере эти состояния пустые, они заполняются электронами после облучения. Образовавшийся таким образом отрицательный заряд создает канал на *n*-слое, что приводит к увеличению обратного тока. Во влажной среде происходит компенсация отрицательного заряда положительным, который образуется на поверхности кристалла. В результате каналообразование уменьшается, что ведет к уменьшению обратного тока. При очень большой влажности на поверхности накапливается большой суммарный положительный заряд, образуется канал на *p*-слое и обратный ток снова растет.

Табл.1. Параметры силовых транзисторов после облучения протонами с энергией 100 МэВ дозой 10^{12} см⁻².

N	$I_{\text{к0}}$, mA		$I_{\text{б0}}$, mA		$B_{\text{т}}$		$U_{\text{бб}}$, V		$U_{\text{кн}}$, V		$U_{\text{кз}}$, V	
	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2
1	2,4	2,9	0,25	0,2	12	7,1	2,7	2,9	2,5	2,8	45	40
2	1,2	2,2	1,2	0,9	8,5	6,6	2,4	2,8	2,4	2,9	55	50
3	4,3	4,9	0,4	0,8	20	11,2	2,6	3,1	2,3	2,7	50	50
4	2,2	2,9	0,4	0,7	21,4	10	3,4	3,7	3,1	3,8	60	55
5	4,4	5,6	0,4	0,8	25	11,2	4,5	4,6	4,2	5	70	65
6	6	7,5	0,4	0,6	16,6	13,8	2,5	2,7	4,1	4,8	65	60
7	4,4	5,5	0,4	0,5	40	18,6	3,4	3,8	3,1	3,9	55	55

Здесь $I_{\text{б0}}$ – обратный ток эмиттера, $U_{\text{бб}}$ – напряжение эмиттер–база, $U_{\text{кн}}$ – напряжение насыщения коллектора, $U_{\text{кз}}$ – напряжение коллектор–эмиттер.

Приведенная модель является, в некотором смысле, основой также для объяснения поведения других облученных полупроводниковых приборов, представляющих собой различные конфигурации *p-n* переходов, и действует также в случаях приложения напряжения смещения к *p-n* переходам. Нами показано, что при увеличении обратного смещения электрическое поле вблизи поверхности перехода увеличивается и при определенной его величине происходит рассасывание отрицательного заряда поверхностных ионов вблизи перехода. В результате, протяженность канала сокращается, он уже не охватывает поверхностный слой вблизи перехода, и обратный ток уменьшается.

Основным результатом данной работы является определение радиационной стойкости полупроводниковых кремниевых диодов и транзисторов, в частности, определение “критических доз” облучения, при которых основные параметры претерпевают резкие изменения и применение соответствующих приборов не представляется возможным. Однако, в каждом конкретном случае нужно исходить из целесообразности использования данного прибора в определенных радиационных условиях с учетом базового кремниевого материала (см. рис.2).

Работа выполнена в Национальном Институте Метрологии РА. Экспериментальные установки для измерения параметров диодов и транзисторов собраны на основе промышленных приборов. Облучение было проведено на ускорителях ЕрФИ и ИФАН Украины.

ЛИТЕРАТУРА

1. **C.Leroy, P.-G.Rancoita.** Rep. Prog. Phys., **70**, 493 (2007).
2. **J.G.Loquet.** IEEE Trans. Nucl. Sci., **NS-48**, 2278 (2001).
3. **S.Duzellier.** Aerospace Science and Technology, **9**, 93 (2005).
4. **E.Normand.** IEEE Trans. Nucl. Sci., **NS-43**, 461 (2001).
5. **P.J.McNulty et al.** Radiation Physics and Chemistry, **43**, 139 (1994).
6. **Н.Риддл.** В сб. «Новые схемы на полупроводниковых приборах». Под ред. А.А.Со-колова, М., изд. ИЛ, 1961, с.9.
7. **И.И.Дончев, О.Ю.Панасюк** и др. В сб. «Моделирование радиационных дефектов». Л., изд. ФТИ АН СССР, с.58, 1990.
8. **В.Л.Винецкий, И.Р.Энтинзон, Г.А.Холодарь.** ФТП, **21**, 643 (1987).

Միլիցիումային կիսահաղորդչային սարքերի պարամետրերի վրա տարբեր ճառագայթահարումների ազդեցությունը

Վ.Ա.Սահակյան

Հետազոտված է տարբեր ճառագայթահարման (էլեկտրոն, նեյտրոն, պրոտոն, գամմա) ազդեցությունը սիլիցիումային սարքերի հիմնական հատկությունների վրա: Հատուկ ուշադրություն է դարձված տրանզիստորների վրա՝ որպես ճառագայթահարման տեսակետից առավել անկայուն կառուցվածք: Ցույց է տրված, որ սարքերի հատկությունները փոփոխվում են պրոտոնների ավելի ցածր դոզաների դեպքում՝ համեմատած մյուս ճառագայթումներին: Ստացված արդյունքները բացատրված են սարքերի մակերեսի վրա լիցքային խոռոչների առաջացմամբ՝ ճառագայթահարման հետևանքով:

INFLUENCE OF DIFFERENT TYPE IRRADIATION ON THE PARAMETERS OF SILICON SEMICONDUCTOR DEVICES

V.A. SAHAKYAN

Different irradiation (electron, neutron, proton, gamma) influence on the main properties of silicon semiconductor devices was studied. Special attention was given on the transistors as a most sensitive structure to irradiation. It was shown that corresponding parameters change at lower doses in the case of proton irradiation in comparison with other irradiations. The results are explained in terms of formation of surface charge channels after irradiation.

УДК 538.945

ЗАВИСЯЩИЕ ОТ ЭКРАНИРОВАНИЯ ПАРАМЕТРЫ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО СОСТОЯНИЯ БИНАРНЫХ СПЛАВОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

А.М. ВОРА

Пармешвари 165, Бхудж-Катч, Гуджарат, Индия

(Поступила в редакцию 25 марта 2008 г.)

С помощью модельного потенциала исследованы зависящие от экранирования параметры сверхпроводящего состояния бинарных сплавов $3d$ -переходных металлов, а именно, константа электрон-фононной связи λ , кулоновский псевдопотенциал μ' , температура перехода T_C , показатель изотопического эффекта α и эффективное взаимодействие MbV . Обнаружено существенное влияние различных обменных и корреляционных функций на величины λ и μ' . Полученные результаты качественно согласуются с имеющимися экспериментальными данными.

1. Введение

В последние годы сверхпроводимость продолжает оставаться динамически развивающейся областью физики твердого тела; продолжают осваиваться новые материалы и растет спрос на новые приборы для тонких технических применений. Многие металлы и аморфные сплавы являются сверхпроводниками с критической температурой T_C в интервале 1–18 К. Даже у некоторых сильно легированных полупроводников были обнаружены сверхпроводящие свойства [1-13]. Многими авторами [1-13] для вычисления параметров сверхпроводящего состояния (ПСС) металлических комплексов успешно использовалась теория псевдопотенциала. Ряд авторов использовали известную модель псевдопотенциала для расчетов ПСС металлических комплексов. В последнее время, с помощью формализма однопараметрического модельного потенциала [3-11], нами изучались ПСС некоторых металлов, бинарных сплавов индия, щелочных металлов, медно-циркониевых металлических стекол, сплавов переходных $5d$ -металлов и ряда других металлических стекол. Изучение ПСС бинарных сплавов на основе сверхпроводников может значительно способствовать определению их применений; исследование зависимости температуры перехода T_C от состава металлических элементов полезно для разработки новых высокотемпературных сверхпроводников. При применении псевдопотенциалов к бинарным сплавам предполагается наличие псевдоионов с усредненными свойствами, которые заменяют три типа ионов в бинарных системах, и газа свободных электронов, находящегося между ними. Взаимодействие электрона с псевдо-ионом учитывается псевдопотенциалом, а взаимодействие между электронами включается в функцию

диэлектрического экранирования. Для правильного предсказания сверхпроводящих свойств сплавов очень существенен подходящий выбор псевдопотенциала и экранирующей функции [3-11].

Для изучения ПСС бинарных сплавов $3d$ -переходных металлов, а именно, константы электрон-фононной связи λ , кулоновского псевдопотенциала μ , температуры перехода T_c , показателя изотопического эффекта α и эффективного взаимодействия N_0V , мы используем в данной работе известный модельный потенциал пустого ядра (ПЯ) Ашкрофта [14]. Для выяснения влияния различных обменных и корреляционных функций на вышеотмеченные свойства мы использовали пять различных видов локально-полевых поправочных функций, предложенных Хартри (Х) [15], Тейлором (Т) [16], Ичимару-Уцуми (ИУ) [17], Фаридом и др. (Ф) [18] и Саркарсом и др. (С) [19]. При исследованиях ПСС бинарных сплавов $3d$ -переходных металлов мы впервые используем более эффективные, недавно развитые локально-полевые поправочные функции, т.е. функции ИУ, Ф и С. Здесь мы используем однопараметрический локальный модельный потенциал ПЯ Ашкрофта для описания электрон-ионных взаимодействий. Форм-фактор $W(q)$ модельного потенциала ПЯ определяется в пространстве волновых чисел (в ат. ед.) как [14]

$$W(q) = \frac{-8\pi Z}{\Omega_0 q 2\varepsilon(q)} \cos(qr_c), \quad (1)$$

где через Z , Ω_0 , $\varepsilon(q)$ и r_c обозначены соответственно валентность, атомный объем, диэлектрическая функция Хартри и параметр модельного потенциала для бинарных сплавов на основе $3d$ -переходных металлов.

2. Техника вычислений

Константа электрон-фононной связи λ вычисляется в настоящей работе из соотношения [3-11]

$$\lambda = \frac{m_b \Omega_0}{4\pi^2 k_F M \langle \omega^2 \rangle} \int_0^{2k_F} q^3 |W(q)|^2 dq. \quad (2)$$

Здесь m_b – зонная масса, M – ионная масса, k_F есть фермиевский волновой вектор и $W(q)$ – экранированный псевдопотенциал. Эффективный средний квадрат фононной частоты $\langle \omega^2 \rangle$ вычисляется с помощью соотношения Батлера [20] $\langle \omega^2 \rangle^{1/2} = 0.69\theta_n$, где θ_n – дебаевская температура бинарных сплавов $3d$ -переходных металлов.

Вводя обозначение $X = q/2k_F$ и учитывая, что $\Omega_0 = 3\pi^2 Z / (k_F)^3$ получим уравнение (2) в следующем виде:

$$\lambda = \frac{12m_b Z}{M \langle \omega^2 \rangle} \int_0^1 X^3 |W(X)|^2 dX, \quad (3)$$

где $W(X)$ экранированный псевдопотенциал ПЯ [13] бинарных сплавов $3d$ -переходных металлов.

Кулоновский псевдопотенциал μ^* дается выражением [3-11]

$$\mu^* = \frac{\frac{m_b}{\pi k_F} \int_0^1 \frac{dX}{\varepsilon(X)}}{1 + \frac{m_b}{\pi k_F} \ln\left(\frac{E_F}{10\theta_D}\right) \int_0^1 \frac{dX}{\varepsilon(X)}}. \quad (4)$$

Здесь E_F – энергия Ферми, $\varepsilon(X)$ – модифицированная диэлектрическая функция Хартри, которая записывается в виде [15]

$$\varepsilon(X) = 1 + (\varepsilon_H(X) - 1)(1 - f(X)), \quad (5)$$

где $\varepsilon_H(X)$ – статическая диэлектрическая функция Хартри [15], а $f(X)$ – локально-полевая поправочная функция. В настоящем исследовании для выяснения влияния обменных и корреляционных эффектов используются локаль-но-полевые поправочные функции (X) [15], (T) [16], (ИУ) [17], (Ф) [18] и (С) [19].

После вычисления λ и μ^* , точка перехода T_C и показатель изотопического эффекта исследуются по формулам Макмиллана [3-11]

$$T_C = \frac{\theta_D}{1.45} \exp\left[\frac{-1.04(1+\lambda)}{\lambda\mu^*(1+0.62\lambda)}\right], \quad (6)$$

$$\alpha = \frac{1}{2} \left[1 - \left(\mu^* \ln \frac{\theta_D}{1.45T_C} \right)^2 \frac{1+0.62\lambda}{1.04(1+\lambda)} \right]. \quad (7)$$

Эффективное взаимодействие N_0V изучается по формуле [3-11]

$$N_0V = \frac{\lambda - \mu^*}{1 + \frac{10}{11}\lambda}. \quad (8)$$

3. Результаты и обсуждение

Исходные параметры и константы, использованные в наших вычислениях, приведены в таблице 1. В таблицу 2 сведены вычисленные значения ПСС, а именно, константа электрон-фононной связи λ , кулоновский псевдопотенциал μ^* , температура перехода T_C , показатель изотопического эффекта α и эффективное взаимодействие N_0V , для бинарных сплавов 3d-переходных металлов при различных концентрациях; приведены также имеющиеся экспериментальные результаты [21-23].

Табл.1. Исходные параметры и другие константы.

Сплавы	Z	r_C , а.у.	Ω_0 , (а.у.) ³	k_F , а.у.	M , а.м.у.	θ_D , К	$\langle \omega^2 \rangle^2$ (а.у.) ² x 10 ⁰⁶
Ti _{0.80} V _{0.20}	4.20	0.7116	113.11	1.0321	48.51	403.60	3.13218
Ti _{0.70} V _{0.30}	4.30	0.6880	110.68	1.0478	48.81	395.40	3.00620
Ti _{0.50} V _{0.50}	4.50	0.7135	105.83	1.0798	49.42	379.00	2.76199
Ti _{0.25} V _{0.75}	4.75	0.7692	99.77	1.1213	50.18	358.50	2.47128
Ti _{0.15} V _{0.85}	4.85	0.7987	97.34	1.1384	50.48	350.30	2.35952
V _{0.90} Cr _{0.10}	5.10	0.6402	92.43	1.1778	51.05	370.00	2.63237
V _{0.90} Cr _{0.10}	5.20	0.6386	91.16	1.1909	51.15	400.00	3.07655
V _{0.90} Cr _{0.10}	5.25	0.6270	90.53	1.1975	51.2	425.00	3.47314
V _{0.80} Cr _{0.20}	5.40	0.6584	88.62	1.2174	51.36	450.00	3.89376
V _{0.75} Cr _{0.25}	5.50	0.6790	87.35	1.2308	51.47	470.00	4.24756
V _{0.60} Cr _{0.40}	5.60	0.6628	86.08	1.2442	51.57	513.20	5.06428
V _{0.50} Cr _{0.50}	5.80	0.7170	83.54	1.2715	51.78	571.60	6.28244
V _{0.40} Cr _{0.60}	5.90	0.6913	82.27	1.2853	51.89	600.80	6.94071
V _{0.20} Cr _{0.80}	5.95	0.6813	81.70	1.2919	51.93	613.94	7.24763
V _{0.10} Cr _{0.90}	4.20	0.7116	113.11	1.0321	48.51	403.60	3.13218
V _{0.055} Cr _{0.945}	4.30	0.6880	110.68	1.0478	48.81	395.40	3.00620

Табл.2. Параметры сверхпроводящего состояния сплавов 3d-переходных металлов.

Сплавы	ПСС	Настоящие результаты					Эксперимент	Процентное влияние (%) [*]	Отклонение (%) ^{**}
		χ	T	ИУ	Φ	C			
Ti _{0.80} V _{0.20}	λ	0.53	0.71	0.74	0.74	0.63	0.54 [21]	18.55–39.95	1.69–37.59
	μ^*	0.13	0.14	0.14	0.14	0.13	–	7.64–8.84	–
	T_C (К)	3.50	8.82	9.83	9.90	6.33	3.5 [21]	–	0.14–182.74
	α	0.37	0.41	0.42	0.42	0.40	–	–	–
	N_0V	0.27	0.35	0.36	0.36	0.32	–	–	–
Ti _{0.70} V _{0.30}	λ	0.61	0.82	0.86	0.86	0.73	0.62 [21]	18.07–39.82	0.94–38.52
	μ^*	0.12	0.13	0.13	0.14	0.13	–	7.56–8.69	–
	T_C (К)	6.14	12.79	13.96	14.04	9.71	6.14 [21]	–	0.03–128.68
	α	0.41	0.43	0.44	0.44	0.43	–	–	–
	N_0V	0.31	0.39	0.41	0.41	0.36	–	–	–
Ti _{0.50} V _{0.50}	λ	0.65	0.86	0.89	0.89	0.76	0.65 [21]	17.24–37.11	–
	μ^*	0.12	0.13	0.13	0.13	0.13	–	7.31–8.46	–
	T_C (К)	7.31	13.78	14.86	14.91	10.90	7.30 [21]	–	0.08–104.28
	α	0.42	0.44	0.44	0.44	0.44	–	–	–
	N_0V	0.33	0.41	0.42	0.42	0.38	–	–	–
Ti _{0.25} V _{0.75}	λ	0.65	0.84	0.86	0.87	0.76	0.65 [21]	16.12–32.79	0.12–37.28
	μ^*	0.12	0.13	0.13	0.13	0.12	–	7.08–8.18	–
	T_C (К)	7.16	12.69	13.54	13.56	10.39	7.16 [21]	–	0.05–89.33
	α	0.43	0.44	0.45	0.45	0.44	–	–	–
	N_0V	0.33	0.40	0.41	0.41	0.38	–	–	–

$Ti_{0.15}V_{0.85}$	λ	0.65	0.82	0.85	0.85	0.75	0.65 [21]	15.46–13.99	0.23–33.09
	μ^*	0.12	0.13	0.13	0.13	0.12	–	6.90–8.01	–
	T_C (K)	7.02	12.15	12.89	12.91	10.05	7.02 [21]	–	0.06–83.93
	α	0.43	0.44	0.45	0.45	0.44	–	–	–
	N_0V	0.33	0.40	0.41	0.41	0.37	–	–	–
$V_{0.90}Cr_{0.10}$	λ	0.51	0.66	0.69	0.69	0.59	0.53 [21], 0.28 [22]	14.60–34.75	0.08–30.89
	μ^*	0.12	0.12	0.13	0.13	0.12	0.20 [22]	6.80–7.84	–
	T_C (K)	3.21	7.41	8.18	8.22	5.21	3.21 [21], 3.21 [22], 2.6 [23], 2.5 [23]	–	0.07–156.07
	α	0.39	0.42	0.42	0.42	0.41	–	–	–
	N_0V	0.27	0.34	0.35	0.35	0.30	–	–	–
$V_{0.80}Cr_{0.20}$	λ	0.45	0.58	0.61	0.61	0.52	0.48 [21], 0.26 [22]	14.29–34.19	3.30–30.30
	μ^*	0.12	0.12	0.13	0.13	0.12	0.19 [22]	6.78–7.81	–
	T_C (K)	1.90	5.21	5.85	5.89	3.40	1.90 [21], 1.90 [22]	–	0.03–209.87
	α	0.36	0.40	0.40	0.40	0.38	–	–	–
	N_0V	0.24	0.30	0.31	0.31	0.27	–	–	–
$V_{0.75}Cr_{0.25}$	λ	0.42	0.55	0.57	0.57	0.48	0.45 [21], 0.32 [22]	14.06–34.29	5.69–26.56
	μ^*	0.12	0.13	0.13	0.13	0.12	0.19 [22]	6.84–7.86	–
	T_C (K)	1.36	4.23	4.81	4.85	2.60	1.36 [21], 1.36 [22]	–	0.07–256.60
	α	0.33	0.38	0.39	0.39	0.36	–	–	–
	N_0V	0.22	0.28	0.29	0.29	0.25	–	–	–
$V_{0.60}Cr_{0.40}$	λ	0.35	0.45	0.46	0.46	0.40	0.38 [21], 0.38 [22]	13.83–32.35	7.68–22.18
	μ^*	0.12	0.12	0.13	0.13	0.12	0.19 [22]	6.86–7.88	–
	T_C (K)	0.37	1.69	2.00	2.01	0.91	0.37 [21], 0.37 [22]	–	0.03–443.27
	α	0.23	0.32	0.33	0.33	0.29	–	–	–
	N_0V	0.18	0.23	0.24	0.24	0.20	–	–	–
$V_{0.50}Cr_{0.50}$	λ	0.31	0.39	0.40	0.40	0.35	0.33 [21], 0.43 [22]	13.61–31.03	6.94–21.94
	μ^*	0.12	0.12	0.13	0.13	0.12	0.18 [22]	6.77–7.80	–
	T_C (K)	0.10	0.69	0.84	0.85	0.32	0.10 [21]	–	0.30–747.40
	α	0.11	0.25	0.26	0.26	0.20	–	–	–
	N_0V	0.15	0.20	0.20	0.20	0.17	–	–	–
$V_{0.40}Cr_{0.60}$	λ	0.28	0.36	0.37	0.37	0.32	0.28 [21], 0.46 [22]	13.25–31.06	0.04–31.11
	μ^*	0.12	0.13	0.13	0.13	0.12	0.18 [22]	6.74–7.85	–
	T_C (K)	0.03	0.33	0.43	0.43	0.13	<0.025 [21], <0.015 [22]	–	–
	α	-0.03	0.17	0.19	0.19	0.10	–	–	–
	N_0V	0.13	0.17	0.18	0.18	0.15	–	–	–
$V_{0.20}Cr_{0.80}$	λ	0.20	0.25	0.26	0.26	0.23	0.20 [21], 0.56 [22]	12.59–28.14	0.05–28.20
	μ^*	0.12	0.13	0.13	0.13	0.12	0.18 [22]	6.82–7.84	–
	T_C (K)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	<0.015 [22]	–	–
	α	-1.58	-0.57	-0.50	-0.50	-0.85	–	–	–
	N_0V	0.07	0.10	0.11	0.11	0.09	–	–	–
$V_{0.10}Cr_{0.90}$	λ	0.20	0.25	0.26	0.26	0.22	0.20 [21], 0.63 [22]	12.45–28.50	0.00–28.50
	μ^*	0.12	0.13	0.13	0.13	0.12	0.18 [22]	6.73–7.84	–
	T_C (K)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	<0.015 [22]	–	–

	α	-1.58	-0.57	-0.49	-0.49	-0.86	–	–	–
	N_0V	0.07	0.10	0.11	0.11	0.09	–	–	–
$V_{0.055Cr_{0.945}}$	λ	0.20	0.25	0.26	0.26	0.22	0.20 [21], 0.88 [22]	12.30–28.55	0.00–28.55
	μ^*	0.12	0.13	0.13	0.13	0.12	–	6.73–7.76	–
	T_C (K)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	<0.015 [22]	–	–
	α	-1.58	-0.57	-0.49	-0.49	-0.86	–	–	–
	N_0V	0.07	0.10	0.11	0.11	0.09	–	–	–

*
П
Р
О
Ц

ентильное влияние различных локально-полевых поправочных функций по отношению к статической экранирующей функции Хартри.

*Отклонение от экспериментальных данных.

Вычисленные значения константы электрон-фононной связи - для бинарных сплавов 3d-переходных металлов с использованием пяти различных локально-полевых поправочных функций и модельного потенциала ПЯ приведены в табл.2 вместе с экспериментальными данными [21,22]. Как видим, X-экранирование дает наименьшее значение λ , в то время как значения, полученные с Φ -функцией, наибольшие. Из табл.2 видно также, что λ постепенно убывает от 0.8651 до 0.5309 при увеличении концентрации ванадия от 0.20 до 0.75, а при увеличении концентрации хрома от 0.20 до 0.945 λ все еще уменьшается. Рост или убывание μ с концентрацией хрома или ванадия указывает на постепенный переход от слабой к умеренной связи при взаимодействии электронов и фононов, что может быть отнесено на счет увеличения гибридизации sp-d электронов ванадия и хрома при увеличении концентрации (x). Это может быть также обусловлено увеличением роли ионных колебаний в области, обогащенной 3d-переходными металлами. Эти результаты находятся в качественном согласии с имеющимися экспериментальными данными [21,22]. В табл.2 дано также процентильное влияние на λ различных локально-полевых поправочных функций по отношению к функции X-экранирования и процентное отклонение от экспериментальных данных [21,22].

Далее в таблице 2 представлены вычисленные величины кулоновского псевдопотенциала μ^* , ответственного за кулоновское взаимодействие между электронами проводимости, полученные с различными локально-полевыми поправочными функциями. Видно, что в бинарных сплавах 3d-переходных металлов значения μ^* лежат в интервале между 0.11 и 0.14, что согласуется с работой Макмиллана [21], где получено $\mu^* \approx 0.13$. Такие значения μ^* свидетельствуют о слабом экранирующем воздействии. В этом случае также наименьшие значения μ^* получаются с экранирующей X-функцией, а наибольшие – с Φ -функцией. В литературе отсутствуют данные по μ^* . Сравнение величины μ^* с теоретическими или экспериментальными данными не приводятся, поскольку такие данные в литературе практически отсутствуют. Для этой величины приведены также процентильные влияния по отношению к экранирующей X-функции. Результаты наших вычислений величины μ^* качественно согласуются с имеющимися в литературе экспериментальными данными [22].

Табл.2 содержит также расчетные значения температуры перехода T_c для бинарных сплавов 3d-переходных металлов с различными локально-полевыми поправочными функциями и экспериментальными результатами [21-23]. Можно отметить, что экранирующая X-функция дает наинизшую, а Φ -функция – наивысшую температуру

перехода. Наши результаты с X-функцией хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными из работ [21-23]. В табл.2 приведены также процентные отклонения от данных [21-23].

Показатель изотопического эффекта α для бинарных сплавов 3d-переходных металлов, вычисленный нами, приведен в табл.2. Расчетные значения α проявляют слабую зависимость от диэлектрического экранирования, при этом наименьшее значение получается для X-функции, а наибольшее – для Φ -функции. Поскольку в литературе пока нет экспериментальных значений α , вычисленные нами значения могут использоваться для исследования ионных колебаний в сверхпроводящих сплавах. Они могут происходить из-за магнитных взаимодействий атомов в таких металлокомплексах. Константа электрон-фононной связи λ зависит от $D(E_F)$ – полной плотности состояний с энергией Ферми. Фотоэмиссионные измерения в бинарных металлических стеклах показывают, что d-полоса расщепляется на две компоненты: одна из них пересекает уровень Ферми и возникает от A-элемента сплава, а другая, от B-элемента, находится ниже уровня Ферми. Относительные интенсивности этих двух компонент сильно меняются с концентрацией. Такое расщепление полосы – хорошо известное явление в концентрированных сплавах, в которых ядерные заряды компонент либо их обменные поля существенно отличаются. В этом случае каждая компонента сплава имеет свою d-полосу, минимально перекрывающуюся с 3d-полосой других компонент. Важно, что B-элемент сплава дает основной вклад в плотность состояний с энергией Ферми [24]. Поэтому с ростом концентрации B-элемента сплава магнитные взаимодействия атомов металлокомплекса усиливаются. Это может быть причиной отрицательных значений α в наших расчетах. Кроме того, взаимодействие электронов с решеткой рассмотрено в нашем случае не полностью, что также может обусловить отрицательность α . Поскольку локально-полевая поправочная X-функция дает наилучший результат для λ и T_c , то можно считать, что значения α , полученные с таким экранированием, наилучшим образом учитывают роль ионных колебаний в сверхпроводящем поведении рассматриваемых систем. Отрицательные значения α получаются в сплавах $V_{0.20}Cr_{0.80}$, $V_{0.10}Cr_{0.90}$, и $V_{0.055}Cr_{0.945}$, что свидетельствует о том, что электрон-фононная связь в этих металлокомплексах не объясняет полностью все особенности сверхпроводящего поведения этих систем. Других теоретических или экспериментальных данных для α , для проведения дополнительных сравнений, в литературе не имеется.

Значения эффективного взаимодействия N_0V приведены в таблице 2 с различными локально-полевыми поправочными функциями. Полученная величина N_0V показывает, что исследуемые бинарные сплавы 3d-переходных металлов относятся к сверхпроводникам со слабой связью. Эта величина также проявляет слабую зависимость от диэлектрического экранирования и имеет наименьшее значение с экранирующей X-функцией и наибольшее – с Φ -функцией. В литературе отсутствуют теоретические либо экспериментальные данные по N_0V , поэтому в таблице нет соответствующих сравнений.

Из табл.2 видно, что из пяти функций экранирования X-функция (статическая, без обмена и корреляций) [15] дает наименьшие значения ПСС, а Φ -функция [18] – наибольшие. Наши результаты с локально-полевыми поправочными T-, ИУ- и С-функциями находятся

между вышеотмеченными значениями. ИУ-, Φ - и С-функции могут давать разумные результаты для ПСС бинарных сплавов $3d$ -переходных металлов, также как и более часто используемые Х- и Т-функции. Эффект от локально-полевых поправочных функций играет важную роль в вычислениях μ , что резко меняет T_c , α и N_0V . Таким образом, мы доказали возможность использования этих более перспективных локально-полевых поправочных функций. Вычисленные величины α и N_0V не дают каких-либо аномальных значений для бинарных сплавов $3d$ -переходных металлов.

Подчеркнем, наконец, важность привлечения точной формы псевдо-потенциала. Надо признать, что хотя эффект от псевдопотенциала велик также в сверхпроводниках с сильной связью, он играет решающую роль в сверхпроводниках со слабой связью, т.е. в тех веществах, которые принадлежат к границе раздела между сверхпроводящей и несверхпроводящей областями. Другими словами, малые изменения величины электрон-ионного взаимодействия могут приводить к резким изменениям сверхпроводящих свойств рассматриваемого материала. В связи с этим важность точной формы псевдопотенциала представляется очевидной.

4. Заключение

Сравнение результатов наших вычислений с имеющимися экспериментальными данными является весьма обнадеживающим в случае бинарных сплавов $3d$ -переходных металлов, что подтверждает применимость модельного потенциала. Какие-либо специальные рекомендации затруднены, т.к. отсутствуют экспериментальные измерения по ПСС большей части бинарных сплавов $3d$ -переходных металлов. Однако, сравнение с другими теоретическими данными подтверждает наши вычисления ПСС. В настоящее время нами проводятся подобные исследования других бинарных сплавов и металлических стекол.

ЛИТЕРАТУРА

1. **A.V. Narlikar, S.N. Ekbote.** Superconductivity and Superconducting Materials. New Delhi–Madras, South Asian Publishers, 1983.
2. **P.B. Allen.** Handbook of Superconductivity, ed. C.P. Poole, Jr. New York, Academic Press, 1999, p.478.
3. **A.M. Vora, M.H. Patel, S.R. Mishra, P.N. Gajjar, A.R. Jani.** Solid State Phys., **44**, 345 (2001).
4. **P.N. Gajjar, A.M. Vora, A.R. Jani.** Mod. Phys. Lett. B, **18**, 573 (2004).
5. **A.M. Vora.** Physica C, **450**, 135 (2006); Physica C, **458**, 21 (2007); Physica C, **458**, 43 (2007).
6. **A.M. Vora.** J. Supercond. Novel Magn., **20**, 355 (2007); J. Supercond. Novel Magn., **20**, 373 (2007); J. Supercond. Novel Magn., **20**, 387 (2007); Phys. Scr., **76**, 204 (2007).
7. **A.M. Vora.** Comp. Mater. Sci., **40**, 492 (2007); Chinese Phys. Lett., **24**, 2624 (2007); J. Optoelec. Adv. Mater., **9**, 2498 (2007); Front. Phys. China, **2**, 430 (2007).
8. **A.M. Vora, M.H. Patel, P.N. Gajjar, A.R. Jani.** Pramana-J. Phys., **58**, 849 (2002).
9. **P.N. Gajjar, A.M. Vora, M.H. Patel, A.R. Jani.** Int. J. Mod. Phys., **B17**, 6001 (2003).
10. **P.N. Gajjar, A.M. Vora, A.R. Jani.** Indian J. Phys., **78**, 775 (2004).
11. **A.M. Vora.** J. Tech. Phys., **48**, 3 (2007); J. Contemp. Phys. (Armenian Acad. Sci.), **43**, 42 (2008).
12. **V.Singh, H.Khan, K.S. Sharma.** Indian J. Pure & Appl. Phys., **32**, 915 (1994).
13. **R.C. Dynes.** Phys. Rev. B, **2**, 644 (1970).
14. **N.W. Ashcroft.** Phys. Lett., **23**, 48 (1966).
15. **W.A. Harrison.** Elementary Electronic Structure. Singapore, World Scientific, 1999.

16. **R. Taylor**. J. Phys. F: Met. Phys., **8**, 1699 (1978).
17. **S. Ichimaru, K. Utsumi**. Phys. Rev. B, **24**, 7386 (1981).
18. **B. Farid, V. Heine, G. Engel, I.J. Robertson**. Phys. Rev. B, **48**, 11602 (1993).
19. **A.Sarkar, D.Sen, H.Haldar, D.Roy**. Mod. Phys. Lett. B, **12**, 639 (1998).
20. **W.H. Butler**. Phys. Rev. B, **15**, 5267 (1977).
21. **W.L. McMillan**. Phys. Rev., **167**, 331 (1968).
22. **K. Anders, E. Bucher, J.P. Maita, R.C. Sherwood**. Phys. Rev., **178**, 702 (1969).
23. **F. Brouers, J. Van der Rest, H.R. Khan**. J. Phys. F: Met. Phys., **14**, 2625 (1984).
24. **R. Hasegawa**. Glassy Metals: Magnetic, Chemical and Structural Properties. Florida, CRC Press, 1980.

SCREENING-DEPENDENT SUPERCONDUCTING STATE PARAMETERS
OF TRANSITION METALS BASED BINARY ALLOYS

A.M. VORA

Study of the screening-dependent superconducting state parameters viz. electron-phonon coupling strength λ , Coulomb pseudopotential μ^* , transition temperature T_C , isotope effect exponent α and effective interaction strength N_0V of 3d-transition metals-based binary alloys is made extensively using a model potential. A considerable influence of different exchange and correlation functions on λ and μ^* is found. The obtained results are in qualitative agreement with the available experimental data wherever exist.

УДК 539.12

ОСОБЕННОСТИ УСТАНОВКИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ДВУХЧАСТИЦНЫХ ЭКСКЛЮЗИВНЫХ РЕАКЦИЙ ПРИ БОЛЬШИХ ПЕРЕДАННЫХ ИМПУЛЬСАХ

А.А. ШАГИНЯН

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

(Поступила в редакцию 4 апреля 2008 г.)

Представлена методика постановки экспериментов по эксклюзивному рассеянию электронов и фотонов на нуклонах при переданных импульсах порядка 10 ГэВ². Описаны многоканальные детекторы, позволяющие реализовать эксклюзивные эксперименты с использованием светимости на уровне 10³⁹ см⁻²/с.

1. Введение

Исследование партонной структуры нуклонов представляет собой одно из основных направлений физики адронов. Многочисленные эксперименты проводятся методами инклюзивного и эксклюзивного рассеяния электронов и фотонов на нуклонах. Инклюзивное рассеяние при больших переданных импульсах в режиме КХД-скейлинга дает информацию о “продольной” структуре нуклонов, в то время как эксклюзивное рассеяние дает информацию о “поперечной” структуре. Возникающая трехмерная картина нуклона представляет большой интерес для исследования в рамках предложенного недавно подхода GPD (general parton distribution) [1,2].

Исследование эксклюзивных процессов является особенно интересным в области больших переданных импульсов выше 1–2 ГэВ², где пионный вклад в изучаемые процессы исчезает и доминируют кварковые степени свободы. В то же время, выполнение экспериментов в области больших переданных импульсов осложняется малой величиной сечения эксклюзивных процессов. Так, например, сечение упругого рассеяния электрона на протоне уменьшается с ростом переданного импульса как $1/Q^4$ (при фиксированной энергии пучка электронов).

В данной работе мы описываем созданные многоканальные детекторы, которые позволили провести исследование эксклюзивных процессов при высоких переданных импульсах, и излагаем ряд оригинальных идей, воплощенных в их конструкциях и электронике. Успешный эксперимент требует оптимального выбора аппаратуры для обеспечения выделения эксклюзивного процесса, максимальной светимости и большого телесного угла установки.

Группа сотрудников Ереванского физического института, проводившая эксперименты на ускорителе ЕрФИ, принимает активное участие в проектировании и

создании многоканальных детекторов в зале А в Амери-канском научном центре СЕВАФ (Лаборатория Джефферсона). В экспериментальном проекте [3] Войцеховским был сформулирован подход к постановке экспериментов с максимальной светимостью и многоканаль-ными детекторами, который использует принципиальную особенность экс-клюдивных процессов, заключающуюся в кинематической связи характе-ристик начальных и конечных частиц в изучаемом процессе. Например, при упругом рассеянии электронов на протонах векторы импульсов конечных частиц лежат в одной плоскости с направлением падающего пучка элек-тронов, а полярный угол рассеянного электрона однозначно связан с полярным углом направления импульса протона отдачи. Другая прин-ципиальная особенность эксклюзивных процессов заключается в величине энергий вторичных частиц. В рассеянии электрона на протоне на фиксированный полярный угол θ энергия электрона в случае упругого рассеяния имеет максимальное значение. Это позволяет проводить предвари-тельный отбор процесса упругого рассеяния электрона методом калори-метрирования энергии электрона. Еще одно важное обстоятельство, облег-чающее постановку экспериментов, мы обнаружили в экспериментах [4]. А именно, энергетический спектр сигналов с электромагнитного калориметра имеет экспоненциальную форму, как следует из рис.1. Таким образом, многоканальный калориметр с высоким координатным разрешением и высоким энергетическим разрешением позволяет уже на этапе триггера проводить частичное выделение процесса упругого рассеяния.

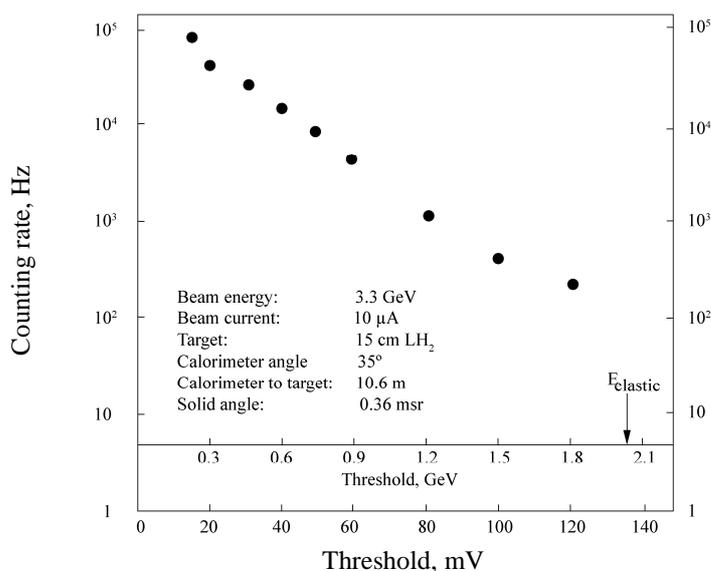


Рис.1. Зависимость скорости счета триггера калориметра от уровня порога.

2. Калориметр для эксперимента по упругому рассеянию фотонов на протонах

Комптоновское рассеяние дает важную информацию о структуре нуклонов, дополнительную к информации, получаемой в упругом рассеянии электронов. Эксперимент по комптоновскому рассеянию на протоне использует тормозной пучок гамма-квантов, жидководородную мишень, магнитный спектрометр для регистрации протона отдачи и многоканальный калориметр, который был создан специально для эксперимента по реальному комптоновскому рассеянию (РКР) [3].

Многоканальный калориметр [4] из блоков свинцового стекла, построенный группой ЕрФИ, использовался в эксперименте РКР – эксперимент E99-114 Лаборатории Джефферсона. Калориметр представляет собой матрицу 22x32 из блоков свинцового стекла с поперечным сечением 4x4 см² и длиной 40 см. Энерговыделение в каждом блоке определялось по сигналу с ФЭУ 84-3. Координаты попадания частиц определялась по методу “центра тяжести”. Данный калориметр представляет значительный интерес в связи с большим количеством элементов и успешным опытом работы в эксперименте при высокой светимости, а также эффективной организацией триггера, использующего полную энергию ливня. В тестовых измерениях координатное разрешение достигало 5–6 мм для электронов с энергией 1 ГэВ, что с избытком обеспечило требования эксперимента. Энергетическое разрешение калориметра достигало 5–6% для электронов с энергией 1 ГэВ в начале эксперимента РКР. Эта величина ухудшилась до 10% по мере накопления радиационных повреждений.

В калориметре блоки были уложены в стальную раму, где две толстые алюминиевые пластины обеспечивали вертикальную и горизонтальную ориентацию. После сборки каждый слой был сжат по горизонтали. Окончательно сложенная матрица была также прижата сверху. Сила была приложена на свинцовые стекла через деревянные бруски с резиновой прокладкой. Вертикальная алюминиевая пластина была установлена перпендикулярно горизонтальной пластине с помощью юстировочных болтов.

Триггер калориметра был построен на базе групп из восьми блоков, сформированных в виде “4x2”. Каждая такая группа вместе с тремя соседними группами использовалась для формирования триггерного сигнала первого уровня T1 (см. рис.2). Монте-карловское моделирование и результаты тестового измерения показали, что утечка энергии ливня за границы групп 32-х блоков не превышает 3% в центральной части калориметра, составляющей 85% его полной площади.

Периферийные блоки не включались в схему организации триггера. Всего в калориметре было выделено 75 групп “4x2”, которые, перекрываясь, формировали 56 сигналов T1. Каждый из сигналов T1 подавался на дискриминатор. Логическое “или” упомянутых дискриминаторов формировало окончательный триггерный сигнал калориметра. Схема электроники и высоковольтного оборудования построена с использованием 100-метровой кабельной трассы, что позволило оперативно перемещать калориметр при изменении кинематики эксперимента.

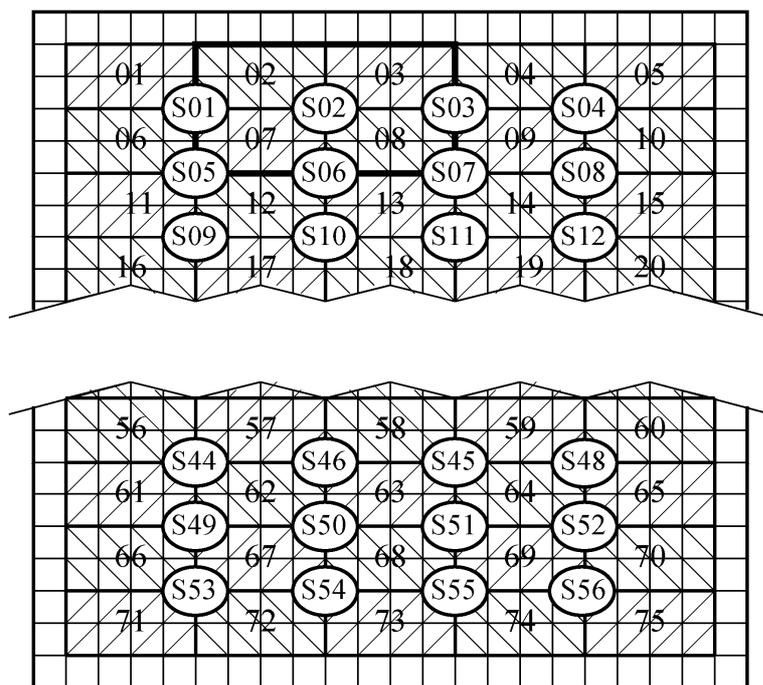


Рис.2. Организация триггера для калориметра РКР. Принцип суммирования с двумя уровнями для триггера калориметра: 75 первичных групп из восьми блоков и 56 групп из четырех перекрывающихся, последние формируют сумму из 32-х сигналов, помеченных как S01–S56. В выделенном примере суммы 02, 03, 07 и 08 формируют сигнал S02.

Физические результаты эксперимента позволили установить механизм РКР [5]. Рис.3 показывает распределение γ - p событий по параметрам δY и E_γ , где E_γ – энергия фотона, определенная калориметром, а δY – разница между расчетной и измеренной в калориметре вертикальной координатой фотона. Расчет координаты делался в предположении об упругом рассеянии фотона на протоне, исходя из энергии и угла вылета протона из мишени. События вблизи $\delta Y = 0$ и энергии фотона 1.2 ГэВ принадлежат процессу РКР (узкий пик на рис.3б). События, сосредоточенные в боковых ветвях на рис.3а, отвечают процессу фоторождения нейтрального пиона, которые кинематически не отделимы от событий РКР. Определение сечения процесса РКР проводится статистически и требует высокого координатного и энергетического разрешения калориметра. Особенно важно координатное разрешение при большой энергии конечного фотона, когда пионное распределение сжимается.

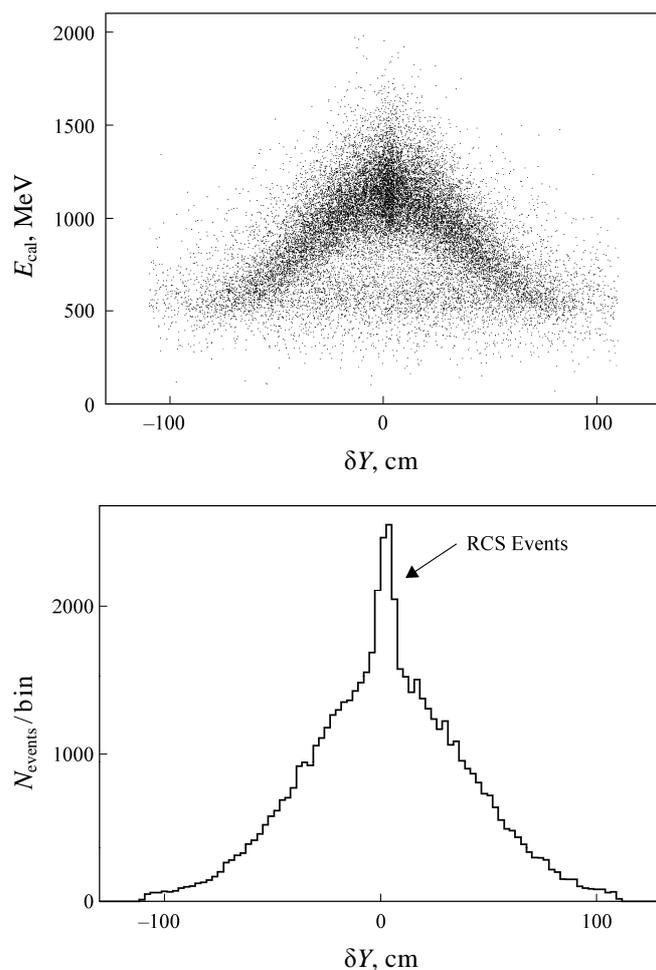


Рис.3. а) Распределение событий по энергии фотона в калориметре в зависимости от разницы между ожидаемой и измеренной координатой для РКР события. б) Распределение событий по разнице между ожидаемой и измеренной в калориметре координатой фотона для РКР события.

3. Многоканальный нейтронный детектор

Эксперимент GEN Лаборатории Джефферсона E02-013 [6] поставлен для измерения электрического форм-фактора нейтрона. В этом случае регистрируются рассеянный электрон и нейтрон отдачи. Мы реализовали мно-гоканальную систему в обоих плечах эксперимента. Для регистрации электронов был построен магнитный спектрометр “BigBite” с телесным углом 100 мср, триггер которого организован с помощью многоканального калориметра из блоков свинцового стекла (описан в следующем разделе). Нейтронное плечо эксперимента – “BigHAND” построено из нескольких сотен сцинтилляционных счетчиков. Детектор был закрыт со стороны мишени двумя слоями антисовпадательных счетчиков V1, V2 (см. рис.4). Вся система счетчиков была защищена от мишени слоем свинца толщиной 5 см и со

всех остальных сторон – слоем железа толщиной 2.5 см. Нейтронное плечо организовано в виде семи стенок N1–N7 (рис.4). Каждая стенка состояла из 40–45 счетчиков. Вертикальные стенки собраны из кассет, каждая из которых включает 5–10 нейтронных счетчиков. Было использовано три разных типа кассет: 1 – содержит 10 счетчиков размером 10x10x160 см³, 2 – содержит 5 счетчиков размером 5x15x180 см³, 3 – содержит 5 счетчиков размером 10x20x180 см³. Использованное разбиение стенки на кассеты решило две важные задачи. Во-первых, это позволило смонтировать детекторы заранее и быстро собрать установку в экспериментальном зале. Во-вторых, кассета содержит 10 счетчиков и поддерживает их. Таким образом, исключается возможность потери режима полного внутреннего отражения при собирании света, которое может произойти, если большое число счетчиков сдавливает нижние счетчики.

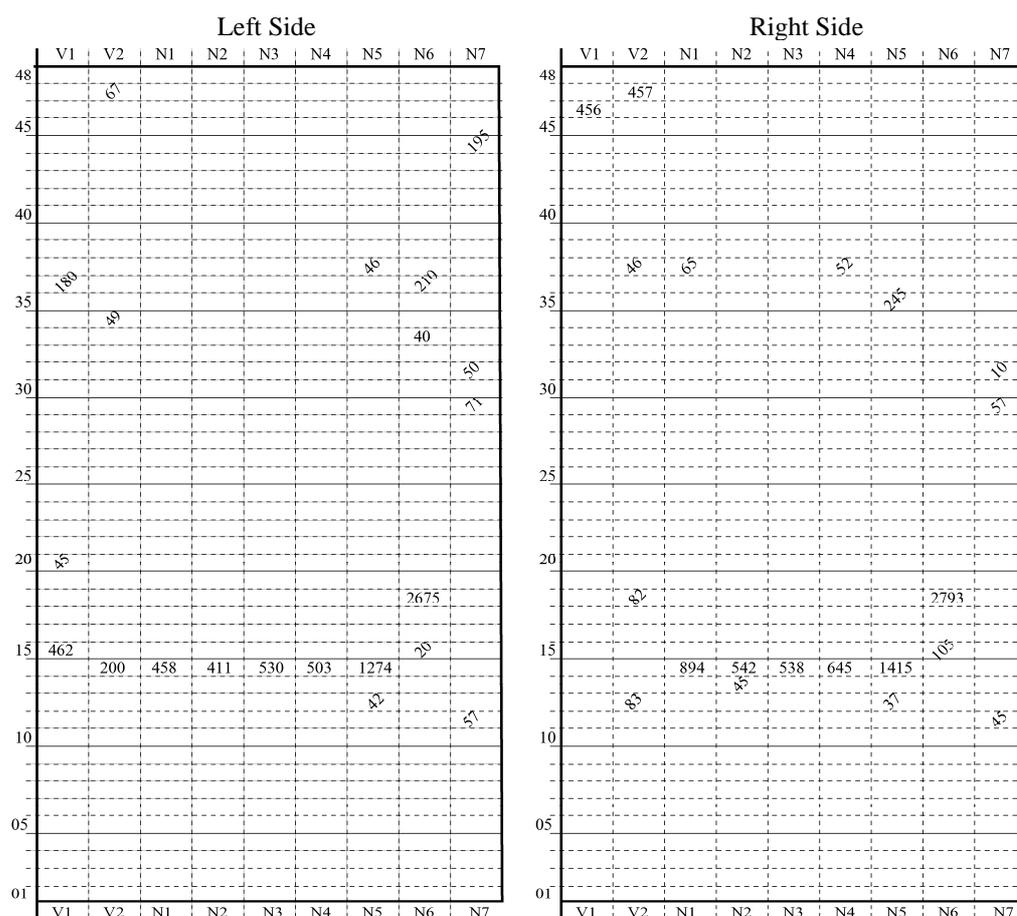


Рис.4. Изображение события №10723 захода 4425 в нейтронном плече. Цифры по оси Y показывают номер блока, а по оси X – детекторные плоскости нейтронного плеча. Цифры в поле детектора показывают амплитуду сигналов (см. текст).

Для организации триггера нейтронный детектор был разбит по вертикали на 15 групп. В каждую группу входят счетчики из семи вертикальных стенок, расположенные по вертикали в пределах 60 см, что покрывает возможную ширину адронного ливня. Сумма сигналов всех счетчиков в группе использовалась для формирования триггера. Во избежание потерь эффективности, соседние группы перекрывались на 30 см.

Вертикальная сегментация нейтронных счетчиков позволяет определить вертикальную координату попадания нейтрона в детектор с точностью 3–5 см. Горизонтальная координата попадания нейтрона определяется с точностью 5–6 см по разнице времен прихода световых сигналов на левый и правый фотоэлектронные умножители нейтронных счетчиков. Нейтронный детектор, расположенный на расстоянии 12 м от мишени, позволяет весьма точно определить угол вылета нейтрона и сделать оценку его импульса по величине времени пролета. На рис.4 для иллюстрации показано одно событие, зарегистрированное во время эксперимента E02–013. Цифры показывают величину сигналов соответствующих ФЭУ, определенных по аналого-цифровому преобразователю (АЦП). Цифры представлены наклоном в случае, когда время появления соответствующего сигнала лежит вне диапазона реальных совпадений (20 нс). Цифры, ориентированные горизонтально, показывают амплитуду сигналов, имеющих время срабатывания в диапазоне реальных совпадений. Хорошо прослеживается цепочка срабатываний на уровне счетчиков №14–15, отвечающих треку протона высокой энергии. Антисовпадательные счетчики на левой стороне тоже сработали.

Выделение процесса квазиупругого выбивания из ядра ${}^3\text{He}$ критическим образом зависит от точного определения угловой корреляции между рассеянным электроном и нейтроном отдачи, поскольку фоновые события, как случайные, так и физический фон, имеют гораздо более широкую угловую корреляцию. Этот эксперимент имел скорость набора полезных событий в 100 раз выше, чем ранее проведенные эксперименты с поляризованными мишенями, в значительной степени благодаря большому числу каналов построенных детекторов.

4. Многоканальный калориметр в триггере спектрометра с большим аксептансом

Недавно коллаборацией GEN [7] в зале А построен магнитный спектрометр “BigBite” с большим телесным углом. В состав спектрометра входят дипольный магнит (максимальное магнитное поле 1.2 Т) и пакет детекторов. Последний включает три многопроволочные дрейфовые камеры, годоскоп пластмассовых сцинтилляционных счетчиков и многоканальный калориметр. Многоканальный калориметр на базе свинцового стекла применен в качестве триггера, а также для идентификации электронов. Калориметр состоит из двух частей – радиатора и поглотителя. Радиатор сделан в виде матрицы 2x7 из блоков 8.5x8.5x34 см³ толщиной 8.5 см в направлении движения частиц. Поглотитель собран из таких же модулей в виде матрицы 7x27 толщиной 34 см в направлении распространения ливня. Свет в каждом блоке регистрировался с помощью ФЭУ-110. Рис.5 показывает событие, зарегистрированное в спектрометре. В калориметре амплитуда сигналов с ФЭУ отображена размером затемненных областей. Легко видеть, что в типичном событии в калориметре

наблюдается только один кластер. Устойчивость калориметра к фону мягких частиц позволила проводить эффективную обработку экспериментальных данных, несмотря на высокую множественность в многопроволочных дрейфовых камерах (рис.5).

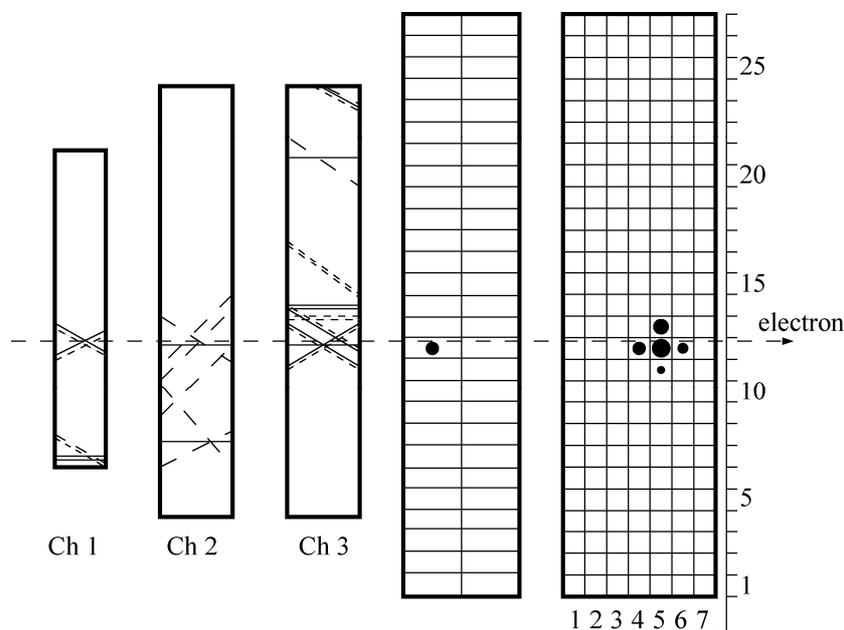


Рис.5. Изображения события в спектрометре BigBite. Показаны сработавшие проволоки в трёх многопроволочных дрейфовых камерах (Ch1, Ch2, Ch3) и энерговыделение в радиаторе и в поглотителе калориметра. Для наглядности плоскости детекторов повернуты на 90°. Площадь кружков в калориметре пропорциональна величине сигналов. Максимальный сигнал в данном событии соответствует 0.80 ГэВ.

Годоскоп пластмассовых сцинтилляционных счетчиков, помещенных между радиатором и поглотителем, предназначен для определения времени попадания частиц. Временное разрешение годоскопа в эксперименте составило 0.25 нс. Нестандартное расположение годоскопа (после радиатора) позволило уменьшить чувствительность годоскопа к частицам низких энергий и, таким образом, многократно понизить скорость счета годоскопа. Рис.6 показывает структуру поглотителя, где мы применили сдвинутые слои, которые позволили избежать накопления смещений, связанных с разбросом размеров стеклянных блоков. Для формирования триггерного сигнала калориметр разбит на 26 вертикальных групп. В каждую группу входят два слоя (4 счетчика) радиатора и два слоя (14 счетчиков) поглотителя. Группы перекрываются по вертикали. Суммарный сигнал с каждой группы подавался на дискриминатор. Порог триггера эксперимента GEN устанавливался на уровне 500–800 МэВ, в зависимости от кинематики измерения. Идентификация электронов проводилась по соотношению амплитуд сигналов в радиаторе и в поглотителе (см. рис.7).

Распределение амплитуд сигналов в радиаторе имеет узкий пик от пионов и широкий максимум от электронов. Форма распределения амплитуд в радиаторе для пионных событий определена с использованием треков положительной кривизны, среди которых пионы доминируют. Форма распределения для электронных событий откалибрована на событиях упругого рассеяния электронов на водородной мишени. Отбор событий с амплитудой выше 450 каналов уже позволяет достаточно подавить пионный фон.

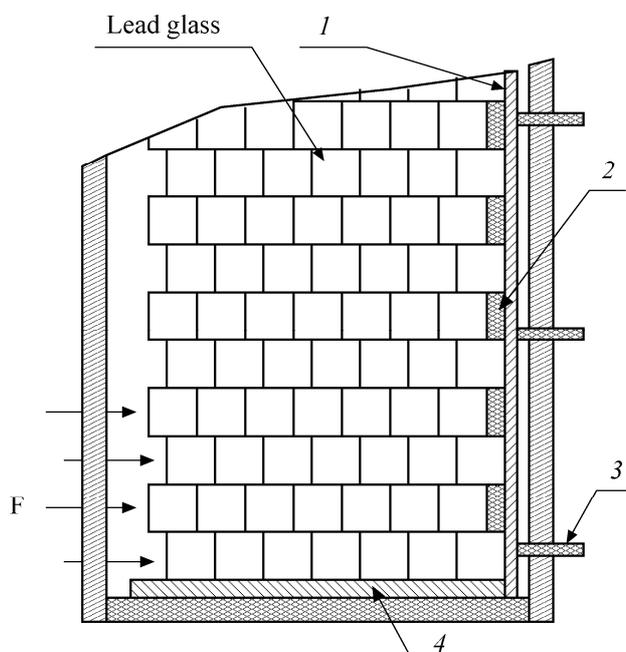


Рис.6. Схематический вид поглотителя. 1 – пластина для вертикальной выставки; 2 – вставка, обеспечивающая сдвиг модулей; 3 – болт для юстировки; 4 – пластина для горизонтальной выставки.

Угловая корреляция между частицей, зарегистрированной в нейтронном детекторе, и электроном, зарегистрированным в магнитном спектрометре, позволяет выделить чистые события квазиупругого выбивания нейтронов из ядер ${}^3\text{He}$ при переданном импульсе 3.4 ГэВ².

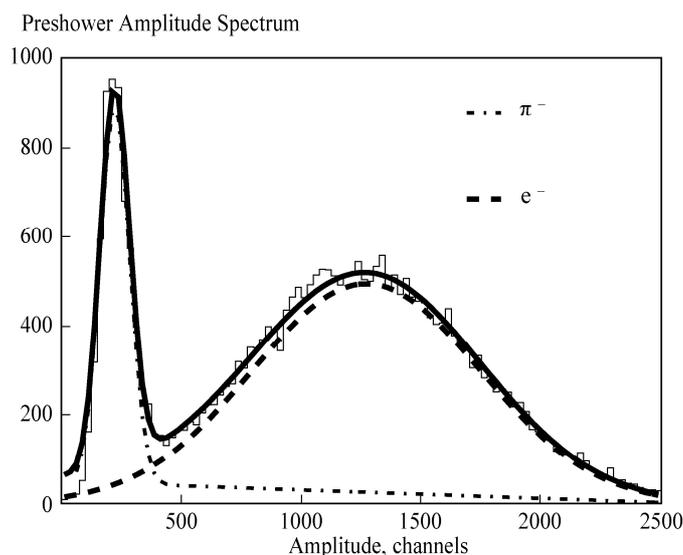


Рис.7. Распределение по амплитуде в радиаторе для событий, наб-ранных в измерении на мишени ^3He .

5. Многоканальные детекторы в будущих экспериментах

Таким образом, в данной работе показано, что многоканальные детекторы, в особенности сегментированные калориметры, позволяют осуществить исследования эксклюзивных процессов при больших переданных импульсах.

Приведенные соображения и разработанная нами методика много-канальных детекторов послужили основой для ряда предложений будущих экспериментов в Лаборатории Джефферсона. Среди этих предложений: 1) измерение электрического форм-фактора нейтрона при переданном импульсе до 7 ГэВ^2 (используются “BigBite” и “BigHAND”). 2) измерение электрического форм-фактора протона при переданном импульсе до 15 ГэВ^2 [8] (используется калориметр, подобный описанному нами в разделе 2).

Автор благодарен членам коллаборации Зала А и персоналу Лаборатории Джефферсона за их вклад в реализацию экспериментов E99-114 и E02-013. Выражаю также признательность администрации Ереванского фи-зического института за постоянное внимание и поддержку этих проектов и сотрудникам группы ЕрФИ, участвовавшим в их реализации. Автор статьи признателен руководителям зала А и экспериментов E99-114, E02-013. Эта работа выполнена в рамках коллаборации ЕрФИ и зала А Лаборатории Джефферсона, США.

ЛИТЕРАТУРА

1. **X.-D. Ji**. Phys. Rev. Lett., **78**, 610 (1997); **A.V. Radyushkin**. Phys. Rev., **D56**, 5524 (1997).
2. **M. Burkardt**. Int. J. Mod. Phys., **A18**, 173 (2003).
3. **B. Wojtsekhowski** et al. JLab experiment E99-114, http://www.jlab.org/exp_prog/proposals/99/PR99-114.pdf.
4. **A. Shahinyan** et al. "The electromagnetic calorimeter in JLab Real Compton Scattering Experiment", arXiv: 0704.1830.
5. **D.J. Hamilton** et al. Phys. Rev. Lett., **94**, 242001 (2005); **A. Danagoulian** et al. Phys. Rev. Lett., **98**, 152001 (2007).
6. **B. Wojtsekhowski**. Bull. Amer. Phys. Soc., Nuclear Physics Fall Meeting 2003. **CB.010** "An experiment to measure GEN at very high Q^2 "; **G. Gates** et al. JLab experiment E02-013. <http://hallaweb.jlab.org/experiment/E02-013>.
7. **B. Wojtsekhowski** et al. Annual Report Hall A, p.69. <http://hallaweb.jlab.org/publications>.
8. **L. Pentchev** et al. "Large Acceptance Proton Form Factor Ratio Measurement at 13 and 15 GeV² Using Recoil Polarization Method". http://www.jlab.org/exp_prog/PACpage/PAC32.

Փոխանցված իմպուլսի մեծ արժեքների երկմասնիկային էքսկլյուզիվ
ռեակցիաների հետազոտման սարքի յուրահատկությունները

Ա.Ն.Շահինյան

Ներկայացված է փոխանցված իմպուլսի 10 GeV² կարգի արժեքների դեպքում նուկլոնների վրա
էլեկտրոնների և ֆոտոնների էքսկլյուզիվ ցրման գիտափորձի մեթոդիկան: Նկարագրված են նաև
բազմականալային դետեկտորները, որոնք հնարավորություն են տալիս իրականացնել էքսկլյուզիվ
գիտափորձեր լուսատվության 10³⁹ սմ⁻²/վ արժեքների դեպքում:

FEATURES OF THE SETUP FOR INVESTIGATION OF TWO-PARTICLE EXCLUSIVE REACTIONS WITH HIGH TRANSFER MOMENTUM

A.H. SHAHINYAN

The technique of experimental design for electron and photon exclusive scattering on nucleons with
transfer momentum values of the order of 10 GeV² is presented. The multichannel detectors providing the
possibility to realize exclusive experiments with luminosity values of
10³⁹ cm⁻²/s are described.

УДК 621.384

ДРАЙВЕР ТЕРАГЕРЦОВЫХ ЛСЭ НА БАЗЕ 20 МэВ-НОГО ЛИНЕЙНОГО УСКОРИТЕЛЯ ЭЛЕКТРОНОВ ЕрФИ

Э.О. АЛЕКСАНЯН¹, Э.М. ЛАЗИЕВ¹, М.Л. МОВСИСЯН²

¹Ереванский физический институт им. А.И.Алиханяна, Армения

²Ереванский государственный университет, Армения

(Поступила в редакцию 1 апреля 2008 г.)

Рассмотрена возможность использования линейного ускорителя электронов на энергию 20 МэВ ЕрФИ (ЛУЭ-20) в качестве драйвера комплекса лазеров на свободных электронах терагерцового диапазона. Приведены структурная схема и основные параметры ЛУЭ-20. Определены требования к электронному пучку и системам ЛУЭ.

1. Введение

В соответствии с программой модернизации Ереванского электронного синхротрона, разработанной в конце 1980-х годов [1], предполагалось создание нового инжектора – линейного ускорителя электронов на энергию 120 МэВ. Был разработан проект такого ускорителя и изготовлены головные образцы оборудования. В силу известных причин проект не был в целом реализован, однако изготовленное оборудование позволило создать в ЕрФИ стенд, включающий в себя линейный ускоритель на энергию 20 МэВ (ЛУЭ-20) [2]. Поскольку надеяться на создание нового инжектора в настоящее время нельзя, то в ЕрФИ разрабатывается концептуальный проект лазера на свободных электронах терагерцового диапазона (ТГц-ЛСЭ) на базе ЛУЭ-20. В настоящей работе приводятся краткое описание ЛУЭ-20, его параметры, формулируются требования к электронному пучку и основным системам ЛУЭ, позволяющие реализовать поставленную задачу.

2. ЛСЭ терагерцового диапазона

Терагерцовые волны (Т-лучи) охватывают область частот $\sim 10^{11}$ – 10^{14} Гц, т.е. занимают промежуток между микроволновым ($\lambda \sim 3$ мм) и инфра-красным ($\lambda \sim 3$ мкм) областями электромагнитного спектра. Огромный интерес к этому диапазону обусловлен целым рядом свойств, присущих Т-лучам, которые и объясняют «терагерцовый бум», охвативший исследовательские центры во многих странах. Отметим некоторые из этих свойств, уже получивших широкое применение как в прикладных, так и фундаментальных исследованиях [3,4]. В этом диапазоне лежат спектры многих важных органических молекул, включая белки и ДНК. Фононные резонансы кристаллических решеток также попадают в эту область частот. Благодаря своей неинвазивности терагерцовые волны, в отличие от

рентгеновских, позволяют проводить безвредную для человека диагностику, в том числе раковых опухолей, глубины и степени ожогов, не нанося вреда биологическим объектам. Особое место занимают Т-лучи в системах контроля и обнаружения оружия и наркотиков. Несмотря на наличие такого широкого спектра потенциальных возможностей Т-лучей, эта область длин волн является наименее освоенной. Проблема в том, что методы как электроники, характерные для генерации микроволнового излучения, так и фотоники неэффективны в области ТГц.

В настоящее время наиболее распространенными методами генерации в этой области частот являются оптическое параметрическое усиление, генерация разностной частоты, параметрическая флуоресценция.

Для получения терагерцового излучения высокого качества решающую роль играют лазеры на свободных электронах (ЛСЭ) [5], использующие электронные пучки релятивистских энергий, полученные в ускорителях. В настоящее время в мире функционирует, проектируется и сооружается ряд таких ЛСЭ [6].

3. Схема ЛСЭ и требования к электронному пучку

На рис.1 приведена классическая схема ЛСЭ, основными элементами которого являются электронный пучок, ондулятор (виглер), создающий пространственно-периодическое магнитное поле, и оптический резонатор. Когда релятивистский электронный пучок пролетает через пространственно-периодическое магнитное поле, то он излучает электромагнитные волны (магнитотормозное излучение, которое в нашем случае называется ондуляторным излучением). Это излучение накапливается в оптическом резонаторе, образованном двумя зеркалами. Часть излучения выводится через одно из зеркал. Максимум спонтанного ондуляторного излучения приходится на частоту, соответствующую длине волны

$$\lambda_r = \frac{\Lambda_u}{2\gamma^2} \left(1 + \frac{K^2}{2} \right), \quad (1)$$

где Λ_u – период ондулятора, γ – энергия электронов, K – параметр ондуляторности, равный $K = eB_0\Lambda_u / 2\pi mc^2 = 0.943\Lambda_u[\text{cm}]B_0[\text{T}]$. Здесь B_0 – магнитное поле ондулятора. Величина K определяет характер спектра излучения: если $K \ll 1$, то излучение монохроматично на длине волны, определяемой (1); с увеличением K ($K \approx 1$) мощность излучения на длине волны (1) максимально и в спектре излучения начинают появляться высшие гармоники. При дальнейшем увеличении K ($K \gg 1$) спектр излучения становится непрерывным. Условно принято, что если $K < 1$, то периодическая магнитная структура является ондулятором, если же $K > 1$ – виглером. Перестройка частоты излучения осуществляется как изменением энергии пучка, так и изменением параметров ондулятора.

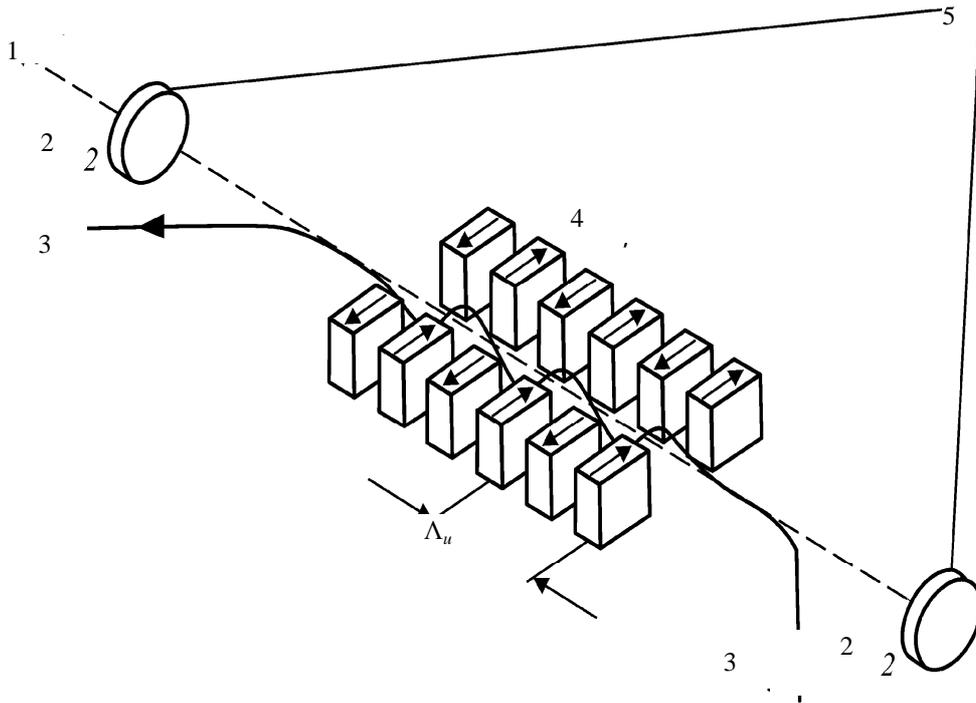


Рис.1. Упрощенная структура ЛСЭ. 1 – лазерный пучок; 2 – зеркало; 3 – электронный пучок; 4 – ондулятор; 5 – оптический резонатор.

Качество излучения ЛСЭ в самом общем случае определяется всеми его компонентами: параметрами электронного пучка, параметрами ондулятора и параметрами оптического резонатора. В этой работе мы сформулируем требования к электронному пучку и, исходя из этих требований, определим, какие нужно сделать изменения в существующем ЛУЭ для того, чтобы удовлетворить эти требования. Будем исходить из критериев, приведенных в [7-10].

Коэффициент усиления мощности излучения за один пролет планарного ондулятора определяется следующей формулой [7]:

$$g_0 = \frac{4\pi \lambda_r L_u I_e}{\gamma \Sigma_e I_\alpha} F \xi \left(\frac{\Delta r_{rad}}{r_{rad0}} \right)^{-2}, \quad (2)$$

где I_e – ток микросгустка, $\xi = \frac{1}{4} \frac{K^2}{(1+K^2/2)} [J_0(Q) - J_1(Q)]$, $Q = (1+K^2/2)$, L – альфеновский ток, $L_u = \lambda_r N_u$ – длина, N_u – число периодов ондулятора, F – коэффициент перекрытия электронного и оптического пучков, r_{rad} – радиус оптического пучка, r_{rad0} – то же в области сужения пучка. Обычно поперечное сечение электронного пучка много меньше поперечного сечения оптического пучка и тогда (2) может быть записано в виде

$$g_0 = \frac{16\pi \lambda_r L_u I_e}{\gamma \Sigma I_\alpha} N^2 \xi, \quad (3)$$

где $\Sigma = 2\pi \sqrt{\left(\frac{r_{rad}^2}{4} + \sigma_x^2\right)\left(\frac{r_{rad}^2}{4} + \sigma_y^2\right)}$ – свертка поперечных сечений оптического и электронного пучков, $\sigma_{x,y}$ – поперечные размеры электронного пучка по x и y . Поскольку поперечное сечение гауссовского оптического пучка меняется вдоль ондулятора, то r_{rad} является усредненным значением по L_u . С учетом энергетического разброса электронного пучка коэффициент усиления будет равен [10]

$$G = \frac{0.85g_0 + 0.19g_0^2}{1 + (1.7 + 0.32g_0)\Delta_e^2}. \quad (4)$$

В этой работе мы оцениваем возможности реализации ТГц-ЛСЭ на базе ЛУЭ-20. Из предварительно выполненного анализа следует, что ЛУЭ-20 может служить драйвером комплекса ЛСЭ, перекрывающих диапазон от 15 мкм до 500 мкм: ЛСЭ-1 (100–500 мкм); ЛСЭ-2 (30–120 мкм) и ЛСЭ-3 (15–40 мкм). Обратимся теперь к критериям оценки качества электронного пучка как драйвера ЛСЭ [8-10].

Как было отмечено выше, энергетический разброс и эмиттанс электронного пучка ограничивают коэффициент усиления ЛСЭ. Ограничение на энергетический разброс определяется следующим неравенством:

$$\frac{\delta E}{E} \ll \left(\frac{\Delta r_{rad}}{r_{rad0}}\right) = \frac{1}{N_u}. \quad (5)$$

Максимальное значение N_u этого диапазона не превышает 100 (см. табл.1), и, следовательно, можно принять $\delta E/E \ll 0.01$. Эмиттанс электронного пучка должен удовлетворять условию $\varepsilon \leq \lambda_r/\pi$.

Перейдем теперь к оценке требуемой длительности микросгустков. При излучении в ондуляторе оптический импульс “скользит” относительно электронного сгустка. Длина “проскальзывания” (slippage) равна $\Delta_{sl} = (c - v_0)\Delta t = N_u \lambda_r$, откуда длина микросгустка $\sigma_e > N \lambda_r$. С другой стороны, от длительности микросгустка зависят как ток сгустка I_e , так и $\delta E/E$, поэтому принимаем, что $N \lambda_r < \sigma_e < 1.5N \lambda_r$.

Предварительные требования к электронным пучкам комплекса ЛСЭ приведены в табл.1. Импульс излучения при параметрах, приведенных в табл.1, будет иметь плато насыщения порядка 3-4 мкс.

Табл.1. Параметры электронных пучков комплекса ЛСЭ.

Параметры	ЛСЭ-1	ЛСЭ-2	ЛСЭ-3
Длина волны излучения, мкм	100–500	30–120	15–40
Энергия электронного пучка, МэВ	1.5–3.0	5.0–10.0	10.0–20.0
Энергетический разброс, $\delta E/E$	0.015	0.01	0.007
Длина микросгустка, σ_e , псек	~9	~7	~5
Заряд в сгустке, пК	~300	~300	~300
Пиковый ток микросгустка, А	~30	~40	~60
Нормализованный эмиттанс, π мм мрад	~25		
Максимальная частота следования микросгустков, МГц	~ (466 или 3000)		
Максимальная длительность макроимпульса, мкс	7.5		
Частота следования макроимпульсов, Гц	6.25; 12.5; 25; 50; 100		

4. ЛУЭ-20 и параметры электронного пучка

Упрощенная структурная схема ЛУЭ-20 приведена на рис.2.

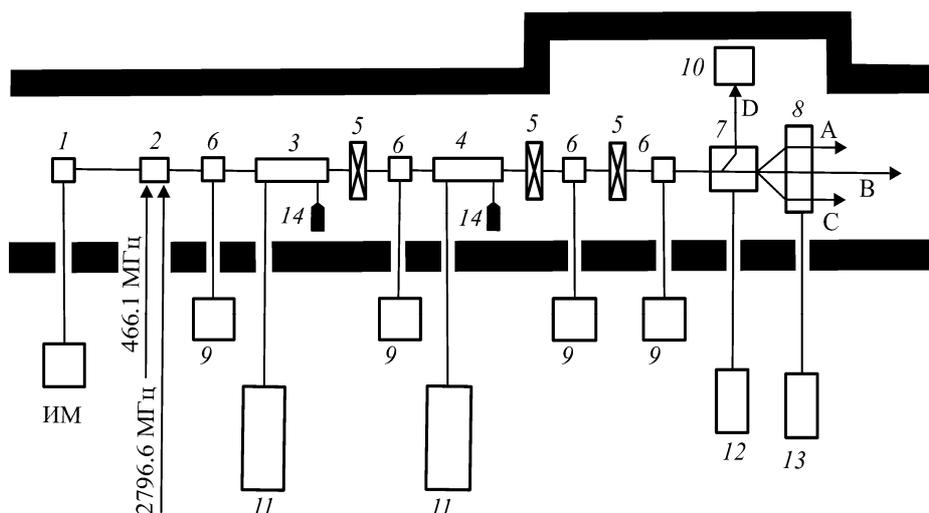


Рис.2. Структурная схема ЛУЭ-20. 1 – источник электронов; 2 – форин-жектер; 3 – инжекторная секция; 4 – основная ускоряющая секция; 5 – магнитные линзы; 6 – мониторы пучка; 7 – распределительный магнит – анализатор спектра энергии электронов; 8 – ахроматическая система параллельного переноса электронного пучка; 9 – консоли датчиков пучка; 10 – поглотитель электронного пучка; 11 – мощная (20 МВт) клистронная станция с волноводным трактом; 12, 13 – консоли 7 и 8, соответственно; 14 – СВЧ нагрузка на выходе 3 и 4; А, В, С, D – выведенный электронный пучок; ИМ – импульсный модулятор источника электронов.

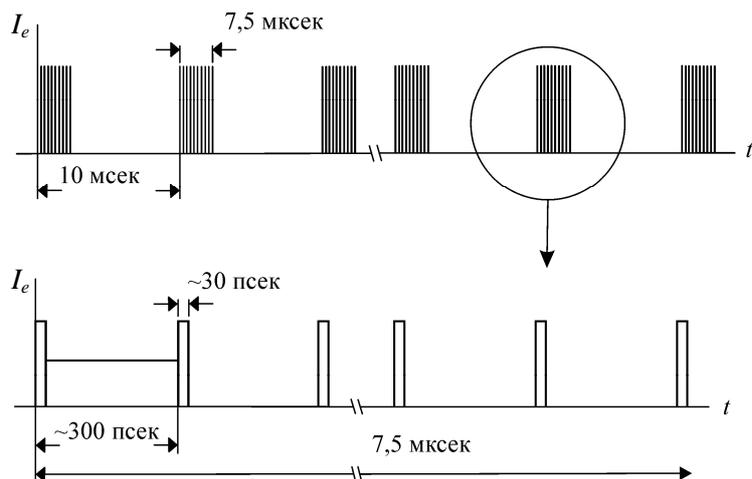


Рис.3. Временная структура тока ускоренного пучка ЛУЭ-20.

Временная структура тока ускоренного пучка электронов I_e показана на рис.3. Частота следования сгустков $f \sim 3$ ГГц ($T_b \sim 300$ псек), длительность микросгустков ~ 30 псек соответствует фазовой протяженности $\sim 36^\circ$ (18°) на частоте ~ 3 ГГц, что подтверждается измеренным энергетическим разбросом электронного пучка (5.0%. Максимальная длительность макроимпульса составила 7.5 мксек при максимальной частоте следования 100 Гц. Как следует из сказанного, при скважности 10 последовательности микро-сгустков в макроимпульсе, ускоренный заряд, переносимый микросгустком, составляет 0.3 нК, что соответствует току 10 А. Таким образом, исходя из сказанного, мы сможем оценить характеристики излучения ЛСЭ и сформулировать требования к отдельным системам ЛУЭ-20. Следует отметить, что ЛУЭ-20 создавался как головная часть нового инжектора синхротрона и что требования к электронному пучку, диктуемые условиями инжекции в синхротрон, и требования к пучку драйвера ЛСЭ различны.

Для того, чтобы обеспечить требуемые параметры электронного пучка (табл.2) необходимо ввести в структуру ЛУЭ-20 ряд существенных изменений: 1) заменить существующий источник электронов на ВЧ-пушку с термокатодом на частоте 466 МГц или 3000 МГц, которая позволит получить ускоренные сгустки с энергией 2–3 МэВ с относительно малой фазовой протяженностью и малым энергетическим разбросом. Выбор частоты 466 МГц связан с тем, что в ЕрФИ имеется в наличии генераторно-ускоряющий модуль на эту частоту, изготовленный в рамках программы модернизации синхротрона; 2) создать системы компрессии сгустков после источника электронов и первой ускоряющей секции; 3) полностью модернизировать систему СВЧ питания ЛУЭ, имея в виду, в первую очередь, замену задающего генератора с большей стабильностью поддержания частоты и низким уровнем амплитудных и фазовых шумов, которые вызывают недопустимый для драйвера ЛСЭ джиттер (jitter) частоты следования микросгустков. Должна быть модернизирована также система импульсного питания мощных клис-

Табл.2. Основные параметры ускоренного электронного пучка ЛУЭ-20.

Параметры	Значения
Номинальная энергия, МэВ	20
Номинальный импульсный ток, А	1.0
Диапазон регулирования энергии, МэВ	5–40
Диапазон регулирования импульсного тока, А	0.01–1.5
Длительность импульсного тока, мксек	0.5–7.5
Частота повторения импульсов, Гц	12.5; 25; 50; 100
Частота повторения электронных сгустков, МГц	2796.6
Энергетический разброс для 80% электронов (%) при 1.0 А	± 5.0
Стабильность тока, %	±5.0
Нормализованный эмиттанс, π мм мрад	50
Длина секции, м	2
Входная СВЧ мощность, МВт	18
КПД ускоряющей структуры, %	60
Число ускоряющих секций	2
Число клистронов	2
Источник электронов (триодный, термокатод), кВ	150

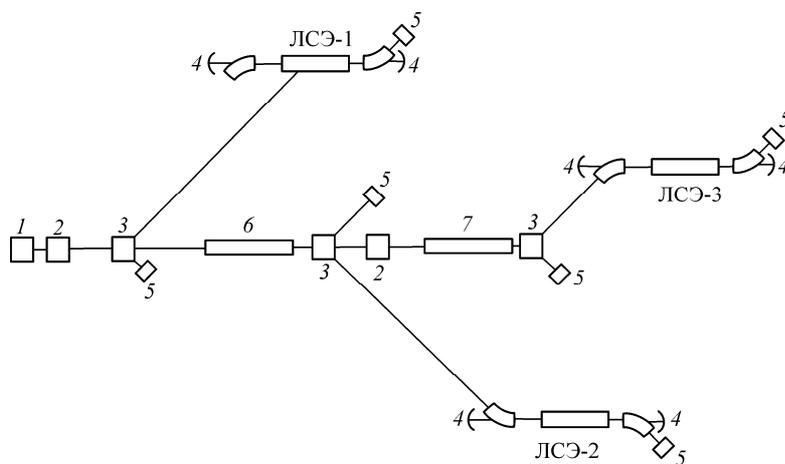


Рис.4. Структурная схема комплекса терагерцовых ЛСЭ на базе ЛУЭ-20. 1 – ВЧ источник электронов (3 МэВ); 2 – компрессор сгустка; 3 – распределительный магнит; 4 – зеркало; 5 – поглотитель электронного пучка; 6 – линейный ускоритель на 10 МэВ; 7 – линейный ускоритель на 20 МэВ.

тронов и введена система стабилизации цепи питания промежуточного усилителя на КИУ-18. Система СВЧ питания ЛУЭ должна быть охвачена цепью обратной связи для обеспечения требуемой стабилизации параметров СВЧ импульса, подаваемого на вход ускоряющих секций ЛУЭ; 4) разработать систему диагностики ускоренных сгустков (длительность и фазовая протяженность сгустков, положение центра сгустка относительно ускоряющей волны, распределение заряда в сгустке и др.).

На рис.4 приведена предлагаемая упрощенная структурная схема комплекса терагерцовых ЛСЭ.

В заключение считаем нужным отметить, что из нашего предварительного рассмотрения следует, что ЛУЭ-20 вполне может служить базой драйвера комплекса ЛСЭ ТГц диапазона.

ЛИТЕРАТУРА

1. **A. Amatuni, E. Laziev**, et al. "The Prospects of Improvement and Development of Accelerator Installations at Yerevan Physics Institute". Proc. of the European Particle Accelerator Conference, Rome, June 7-11, **1**, 305 (1988). http://accelconf.web.cern.ch/AccelConf/e88/PDF/EPAC1988_0305.PDF.
2. **E.M. Laziev** et al. "Yerevan 20 MeV Linac Test-Facility". Proc. of the LINAC-94, Tsukuba, **2**, 926 (1994).
3. Opportunities in THz Science. Report of a DOE-NSF-NIH Workshop held February 12-14, 2004, Arlington, VA. http://www.sc.doe.gov/bes/reports/files/THz_rpt.pdf.
4. "Генерация и применение терагерцового излучения". Материалы первого рабочего совещания, 24-25 ноября 2005 г., Новосибирск, 2006.
5. "THz output from 4GLS and its prototype ERLP", 4GLS Conceptual Design Report, 2006, <http://www.4gls.ac.uk>.
6. **W.B. Colson** et al. Free Electron Lasers in 2004. Proc. of the 27th International Free Electron Lasers Conference, 21-26 August 2005, Stanford, California, USA, pp.347-350, 2005. <http://cern.ch/AccelConf/f04/papers/THPOS58/THPOS58.PDF>.
7. **E.L. Saldin, E.A. Schneidmiller, M.V. Yurkov**. The Physics of Free Electron Lasers. Berlin, Springer-Verlag, 2000.
8. **A.F. Wrulich**. Free Electron Lasers. CAS, 1-13 October 2006, Zakopane, Poland, 2006. <http://cas.web.cern.ch/cas/Zakopane-2006/PDFs/Wrulich-FEL.pdf>.
9. **A. Gover, E. Dyunin**. Coherence of e-Beam Radiation Sources and FELs. Proc. of FEL-2006, BESSY, Berlin, Germany, 2006, pp.1-12. <http://cas.web.cern.ch/cas/Zakopane-2006/PDFs/Wrulich-FEL.pdf>.
10. **T. Tomimasu**. NIM in Physics Research A, **393**, 230 (1997).

DRIVER OF THZ-FELS BASED ON THE YERPHI 20 MeV LINEAR ACCELERATOR

E.O. ALEKSANYAN, E.M. LAZIEV, M.L. MOVSISYAN

An opportunity of using the 20 MeV Linac at YerPhI as a driver of THz-FELS is considered. The basic parameters of the Linac and FELs are given. Requirements to the electron beam and Linac systems are determined.

УДК 548.5

ВЫРАЩИВАНИЕ ПРОФИЛИРОВАННЫХ МОНОКРИСТАЛЛОВ ЙОДАТА ЛИТИЯ С ПОМОЩЬЮ ФОРМООБРАЗОВАТЕЛЯ ИЗ ПОЛИМЕРНЫХ НАНОЧАСТИЦ

А.А. ОГАНЕСЯН¹, Г.К. ГРИГОРЯН¹, А.К. АТАНЕСЯН²

¹НТЦ органической и фармацевтической химии НАН Армении, Ереван

²Институт прикладных проблем физики НАН Армении, Ереван

(Поступила в редакцию 19 марта 2008 г.)

Показана возможность выращивания профилированных монокристаллов (-LiIO₃ с полым каналом с помощью формообразователя из полимерных наночастиц. Описан метод получения наночастиц полистирола.

В различных устройствах и приборах монокристаллы используются после предварительной обработки, которая придает кристаллу необходимую внешнюю форму. Для получения нужного изделия надо выращенный кристалл распилить, выточить, отшлифовать, отполировать, просверлить и т.д. При всех этих операциях имеют место значительные потери дорогостоящего материала (в некоторых случаях до 90%). Однако основной проблемой является то, что не всегда возможно с помощью механической обработки придать кристаллу нужный профиль. Эти обстоятельства во многом снижают возможности применения выращенного кристалла и препятствуют усовершенствованию самых разнообразных приборов, работающих на полупроводниковых, пьезо- и оптически активных материалах. Немаловажным фактором, препятствующим применению моно-кристаллов, является также сильное ухудшение их физических свойств при механической обработке.

Одним из перспективных путей решения указанных проблем, несомненно, является нахождение способов выращивания монокристаллов нужного профиля [1].

Выращивание профилированных монокристаллов – малоизученная область в науке о росте кристаллов. Работы над выращиванием профилированных монокристаллов находятся еще на этапе решения задачи формообразования, а публикации, посвященные детальному изучению свойств профилированных материалов, отсутствуют. На практике монокристаллы нужного профиля в настоящее время удается выращивать только из расплава по методу Степанова [1]. Однако большую актуальность имеет решение вопросов, связанных с выращиванием профилированных монокристаллов из растворов неорганических солей, тем самым, по возможности уменьшая структурные нарушения, вносимые обработкой монокристалла. Получение трубок и колец из таких кристаллов, как α -LiIO₃, способствовало бы усовершенствованию различных приборов и

нахождению новых областей применения монокристаллов этой соли. В работе [2] сообщается о возможности выращивания монокристаллов α -LiIO₃ с полыми каналами разного сечения с применением полимерных материалов, в частности, тонких полимерных пленок. Основным нерешенным вопросом в указанной работе было устранение часто возникающих трещин на внутренней поверхности растущего монокристалла, что, фактически, сводит на нет длительные подготовительные работы и труд, затраченный на выращивание монокристалла. Появление трещин обусловлено многими факторами, основными из которых можно считать неровности на внешней поверхности формообразователя и разность теплопроводностей растущего монокристалла и материала формообразователя. Последнее обстоятельство обуславливает возникновение температурного градиента при рассеивании теплоты кристаллизации и может стать причиной возникновения напряжения в кристалле.

Для устранения указанных недостатков, в настоящей работе возможные микровпадины и трещины на поверхности материала формообразователя были заполнены наноразмерными полимерными частицами. Полимерные частицы были выращены в статической системе мономер–вода. Впервые о возможности проведения полимеризации в статических условиях указано в наших предыдущих работах [3,4]. На основе этих работ нами разработаны условия выращивания полимерных наночастиц в трехфазной статической системе монокристалл K₂S₂O₈–вода–стирол. Схематически эта система изображена на рис.1. Полимеризация возбуждается на границе раздела стирол–вода и сопровождается зарождением полимерной дисперсной фазы наподобие массовой кристаллизации из растворов. Одновременно с процессами полимеризации протекает растворение кристалла K₂S₂O₈ и создается градиент плотности по высоте кристаллизационного аппарата. В результате этих физикохимических процессов на межфазной границе появляются полимерно-мономерные частицы, плотность которых во времени растет и начинается их массовое погружение в воду (плотность полистирола равна 1,05 г/см³).

Таким способом добились скопления наночастиц полимера на высоте, где плотность водной фазы превышает плотность полимера. Электронный фотоснимок полученных сферических частиц приведен на рис.2, из которого видно, что полимерные частицы, полученные по описанному методу, имеют очень узкое распределение по диаметру (примерно 50 нм).

Монокристалл персульфата калия и полимерные частицы были выращены в пробирках в кристаллизационном аппарате, описанном в [5]. Температура полимеризации равнялась 50°C. Высота водной фазы составляла 60 мм, диаметр пробирок – 28 мм. Во всех сериях опытов по истечении 120–130 мин примерно в средней части водной фазы, на расстоянии 30 мм от поверхности монокристалла, образовывалось мутное кольцо (рис.1).

Фотоснимок профилированного монокристалла α -LiIO₃, содержащего полый канал, который был выращен с помощью формообразователя из полученных нами полимерных наночастиц, приведен на рис.3. Технология изготовления формообразователя описана в работе [6].

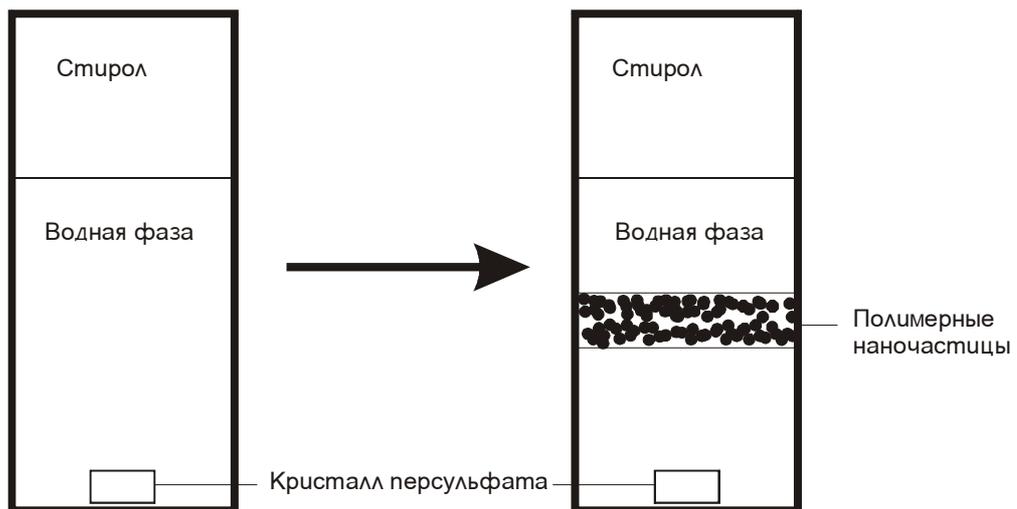


Рис.1. Схематическое изображение установки для получения полимерных наночастиц.

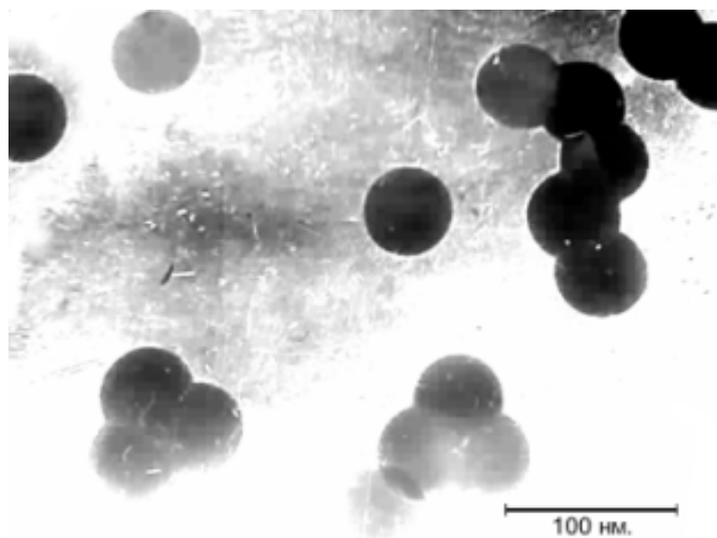


Рис.2. Электронный фотоснимок полимерных наночастиц.



Рис.3. Профилированный монокристалл йодата лития.

ЛИТЕРАТУРА

1. **В.Н. Маслов.** Выращивание профильных полупроводниковых монокристаллов. М., Металлургия, 1977.
2. **А.А.Оганесян, Г.К.Григорян, А.К.Атанесян.** Выращивание профильных монокристаллов из водных растворов неорганических солей. Ениколоповские чтения, сб. трудов, Ереван, 2001, с.53.
3. **А.А. Оганесян, В.Г. Бояджян, А.В. Гукасян, И.А. Грицкова, А.Н. Праведников.** ДАН СССР, **281**, 1145 (1985).
4. **А.А. Оганесян, Г.К. Григорян, Г.М. Мурадян.** Хим. ж. Армении, **3**, 130 (2006).
5. **А.К. Атанесян, Л.С. Балаян, А.А. Оганесян.** Изв. НАН и ГИУ Армении, сер. ТН, **41**, 207 (1998).
6. **А.А. Оганесян, А.В. Гукасян, В.Г. Бояджян.** Формообразователь для выращивания полых кристаллов из раствора неорганических солей. АС СССР № 674203, 1987.

Լիթիումի յոդատի պրոֆիլ-լավորած միաբյուրեղների աճեցումը պոլիմերային նանոմասնիկների կաղա-պարային կառուցվածքի օգնությամբ

Ա.Ա.Հովհաննեսյան, Գ.Կ.Գրիգորյան, Ա.Կ.Աթանեսյան

Ցույց է տրված պրոֆիլացված α -LiIO₃ միաբյուրեղների աճեցման հնարավորությունը պոլիմերային նանոմասնիկների կաղապարային կառուցվածքի օգնությամբ: Նկարագրված է պոլիստիրոլի նանոմասնիկների ստացման եղանակը:

GROWTH OF PROFILED SINGLE CRYSTALS OF LITHIUM IODATE USING A SHAPER FROM POLYMER NANOPARTICLES

A.A. HOVHANNESYAN, G.K. GRIGORYAN, A.K. ATANESYAN

A possibility of growth of profiled single crystals of α -LiIO₃ with a hollow channel using a shaper from polymer nanoparticles is showed. A method of creating the nanoparticles of polystyrene is described.

УДК 541.64

ПЕРЕХОД СПИРАЛЬ–КЛУБОК ПРИ НАЛИЧИИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕЖДУ ДВУМЯ ЦЕПЯМИ

А.В. ЦАРУКЯН¹, Ш.А. ТОНОЯН¹, Г.Н. АЙРАПЕТЯН¹,
И.В. БАГДЯН², Е.Ш. МАМАСАХЛИСОВ¹, В.Ф. МОРОЗОВ¹

¹Ереванский государственный университет, Армения

²Ереванский государственный медицинский университет, Армения

(Поступила в редакцию 30 апреля 2008 г.)

На основе ранее введенной обобщенной модели полипептидной цепи (ОМПЦ) рассмотрен переход спираль–клубок в двух цепях, взаимодействующих между собой бок о бок, причем существует четыре типа взаимодействия (hh, hc, ch, cc). Гамильтониан системы включает в себя сумму базовых гамильтонианов ОМПЦ отдельных цепей и член, отвечающий за взаимодействие. Показано, что преобладание энергии однотипного взаимодействия (hh, cc) над смешанным (hc, ch) приводит к резкому возрастанию корреляционной длины и сужению интервала плавления системы. Нетривиальное поведение системы наблюдается в альтернативном случае преобладания энергии смешанного взаимодействия (hc, ch) над однотипным (hh, cc). В этом случае также наблюдается рост корреляционной длины, а кривая денатурации имеет двухступенчатый характер. Доля стыков и средняя длина спирального участка показывают, что имеет место слияние и распад спиральных участков.

1. Введение

Широко известно, что биополимеры *in vivo* компактизованы в структуры различной природы. Так, двухспиральная ДНК в структуре хромосомы намотана на гистон с вполне определенным радиусом, что приводит к сближению цепей и их взаимодействию. ДНК в бактериофагах и вирусах упакована в капсид, размеры которого сравнимы с длиной жесткости ДНК, что опять-таки является причиной взаимодействия спиралей. Природные белки находятся в глобулярном состоянии, возникающем из-за отталкивания между гидрофобными повторяющимися единицами и водой, что также приводит к межспиральным взаимодействиям. Некоторые сократительные белки состоят из параллельно упакованных спирализованных цепей.

Таким образом, возникает необходимость описывать влияние взаимодействия между цепями на переход спираль–клубок. Эти взаимодействия накладывают дополнительные ограничения на конформационные переходы в соседних цепях, активируя или подавляя эти переходы. Такие исследования были проведены в [1-4].

Ранее нами было исследовано совместное влияние на переход спираль–

клубок в ДНК взаимодействия различных масштабов в рамках одной цепи [5]. В данной статье исследуется переход спираль-клубок в рамках обобщенной модели полипептидной цепи с межцепочечными взаимодействиями.

2. Базовая модель (ОМПЦ)

Ранее нами была предложена микроскопическая теория перехода спираль-клубок, применимая как для полипептидов, так и для ДНК, называемая обобщенной моделью полипептидной цепи [5-12]. Поскольку дальнейшие исследования будут проводиться на ее основе, приведем ее основные положения как базовой модели.

Гамильтониан ОМПЦ имеет вид

$$-\beta H = J \sum_{i=1}^N \prod_{k=\Delta-1}^0 \delta(\gamma_{i-k}, 1) = J \sum_{i=1}^N \delta_i^{(\Delta)}, \quad (1)$$

где $\beta = T^{-1}$, N — число повторяющихся единиц, $J = U/T$ — энергия водородной связи, приведенная к температуре, $\delta(\gamma_i, 1)$ — символ Кронекера, γ_i — переменная, описывающая конформацию одной повторяющейся единицы и принимающая значения от 1 до Q (Q — число конформаций одной повторяющейся единицы). Значение $\gamma_i = 1$ означает, что повторяющаяся единица находится в спиральном состоянии, а остальные $(Q-1)$ конформаций соответствуют клубкообразному состоянию. Произведение символов Кронекера $\delta_i^{(\Delta)} = \prod_{k=\Delta-1}^0 \delta(\gamma_{i-k}, 1)$ обеспечивает выделение энергии J только в том случае когда

Δ подряд соседних повторяющихся единиц находятся в спиральной конформации, обозначенной нами номером 1. Трансфер-матрица ОМПЦ для конкретных значений Δ и Q на базе гамильтониана (1) имеет вид матрицы:

$$G = \begin{pmatrix} e^J & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & Q-1 \\ 1 & 1 & 1 & \dots & 1 & 1 & Q-1 \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где элемент (1,1) равен e^J , все элементы последней строки равны 1, элементы первой верхней псевдодиагонали равны 1, элементы $(\Delta-1, \Delta)$ и (Δ, Δ) равны $Q-1$, все остальные элементы равны нулю.

Статистическая сумма в термодинамическом пределе модели имеет следующий вид [13]:

$$Z = \text{Tr} G^N = \text{Tr} A \Lambda^N B = \sum_{k=1}^{\Delta} \lambda_k^N, \quad (3)$$

где использованы левые A и правые B собственные векторы трансфер-матрицы G , а $\{\lambda_k\}$ – собственные значения матрицы G , которые определяются характеристическим уравнением

$$\lambda^{\Delta-1}(\lambda - e')(\lambda - Q) = (e' - 1)(Q - 1). \quad (4)$$

Учитывая теорему Фробениуса–Перрона [14], в термодинамическом пределе ($N \rightarrow \infty$) статсумма может быть представлена как

$$Z = \lambda_1^N,$$

где λ_1 – главное собственное значение матрицы G .

На основе трансфер-матричного представления ОМПЦ были вычислены следующие усредненные характеристики модели, которые могут быть либо измерены экспериментально, либо помогают осмыслению деталей перехода спираль–клубок [5-12]: 1) степень спиральности, средняя доля повторяющихся единиц, связанных водородными связями; 2) двухчастичный пространственный коррелятор, который описывает взаимозависимость образования водородных связей в точках i и $i+r$; 3) корреляционная длина, которая соответствует масштабу затухания корреляций вдоль цепи при больших r ; 4) средняя доля стыков между спиральными и клубкообразными участками цепи; 5) средняя длина спирального участка.

3. Взаимодействие двух цепей ОМПЦ

Рассмотрим две цепи, описываемые ОМПЦ, которые взаимодействуют между собой так, что взаимодействуют повторяющиеся единицы с одинаковым номером, причем взаимодействие зависит от состояния повторяющейся единицы так, что энергия взаимодействия зависит от того, связана ли повторяющаяся единица водородной связью (h) или нет (c). Таким образом, имеется четыре типа взаимодействия (hh , hc , ch , cc), в связи с чем гамильтониан системы может быть записан в виде

$$\begin{aligned} -\beta H = & J_0 \sum_{i=1}^N \delta_i^{(\Delta)} + J_0 \sum_{j=1}^N \delta_j^{(\Delta)} + I_{hh} \sum_{i,j=1}^N \delta_i^{(\Delta)} \delta_j^{(\Delta)} + I_{hc} \sum_{i,j=1}^N \delta_i^{(\Delta)} (1 - \delta_j^{(\Delta)}) + \\ & + I_{ch} \sum_{i,j=1}^N (1 - \delta_i^{(\Delta)}) \delta_j^{(\Delta)} + I_{cc} \sum_{i,j=1}^N (1 - \delta_i^{(\Delta)}) (1 - \delta_j^{(\Delta)}). \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь первые два члена определяют гамильтониан ОМПЦ для каждой из цепей. Следующие 4 члена определяют взаимодействие между цепями: первый – для взаимодействия между двумя спиральными состояниями (hh), следующий – для взаимодействия спирального и клубкообразного состояний цепей (hc) и т.д.

Раскрывая скобки и приведя подобные члены, получаем с точностью до константы

$$-\beta H = (J_0 + I_{hc} - I_{cc}) \sum_{i=1}^N \delta_i^{(\Delta)} + (J_0 + I_{ch} - I_{cc}) \sum_{j=1}^N \delta_j^{(\Delta)} + (I_{hh} + I_{cc} - I_{hc} - I_{ch}) \sum_{i=j=1}^N \delta_i^{(\Delta)} \delta_j^{(\Delta)}. \quad (6)$$

Таким образом, с учетом идентичности обеих цепей ($I_{hc} = I_{ch}$) и после обозначений $J = (J_0 + I_{hc} - I_{cc}) = (J_0 + I_{ch} - I_{cc})$, $I = I_{hh} + I_{cc} - I_{hc} - I_{ch} - I_{cc}$, гамильтониан запишется в виде

$$-\beta H = J \sum_{i=1}^N \delta_i^{(\Delta)} + J \sum_{j=1}^N \delta_j^{(\Delta)} + I \sum_{i=j=1}^N \delta_i^{(\Delta)} \delta_j^{(\Delta)}. \quad (7)$$

При различном соотношении параметров исходного гамильтониана (5), приведенные параметры гамильтониана (7) могут принимать следующие значения.

1. $J > 0$, $I > 0$. Этот случай эффективно стабильной спиральной структуры и эффективного межцепочечного притяжения соответствует высокой стабильности спиральной структуры (большое J_0) и превосходству однотипных взаимодействий (hh и cc) над разнотипными (hc и ch).

2. $J > 0$, $I < 0$. Этот случай эффективно стабильной спиральной структуры и эффективного межцепочечного отталкивания соответствует наибольшей эффективности межцепочечного смешанного взаимодействия (большие значения I_{hc} и I_{ch})

3. $J < 0$, $I > 0$. Этот случай эффективно нестабильной спиральной структуры и эффективного межцепочечного притяжения соответствует отрицательным J_0 и наибольшей эффективности межцепочечного однотипного взаимодействия (большие значения I_{hc} и I_{ch}).

Мы будем исходить из положительности выражения полной энергии гамильтониана, т.е. $2J + I > 0$, из чего следует $2J_0 + I_{hh} - I_{cc} > 0$. Поэтому случай $J < 0$, $I < 0$ рассматриваться не будет.

В случае $I = 0$ трансфер-матрица M для гамильтониана (7) сводится к прямому произведению трансфер-матриц G , соответствующих гамильтонианам (1) для двух цепей, т.е.

$$M = G \otimes G. \quad (8)$$

Матрица M имеет порядок $\Delta^2 \times \Delta^2$, причем только элемент M_{11} содержит член e^{2J} , отражающий суммарную энергию обеих цепей, остальные элементы либо содержат энергии одной цепи, либо не содержат энергии вовсе. Проиллюстрируем это для случая $\Delta = 2$. Трансфер-матрица для базового гамильтониана имеет вид

$$G = \begin{pmatrix} e^J & Q-1 \\ 1 & Q-1 \end{pmatrix}. \quad (9)$$

Для прямого произведения трансфер-матрицы базовой модели (9) самой на себя получается следующий результат, соответствующий $I = 0$:

$$M(I=0) = \begin{pmatrix} e^{2J} & e^J(Q-1) & e^J(Q-1) & (Q-1)^2 \\ e^J & e^J(Q-1) & Q-1 & (Q-1)^2 \\ e^J & Q-1 & e^J(Q-1) & (Q-1)^2 \\ 1 & Q-1 & Q-1 & (Q-1)^2 \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Для случая отличной от нуля энергии межцепочечного взаимодействия I эту энергию может содержать только член M_{11} и результат переписывается как

$$M = \begin{pmatrix} e^{2J+I} & e^J(Q-1) & e^J(Q-1) & (Q-1)^2 \\ e^J & e^J(Q-1) & Q-1 & (Q-1)^2 \\ e^J & Q-1 & e^J(Q-1) & (Q-1)^2 \\ 1 & Q-1 & Q-1 & (Q-1)^2 \end{pmatrix}. \quad (10a)$$

Таким образом, для гамильтониана (7) трансфер-матрица может быть представлена в виде

$$M = G \otimes G + e^{2J}(e^J - 1)P, \quad (11)$$

где P – матрица порядка $\Delta^2 \times \Delta^2$, в которой $P_{11} = 1$, а остальные элементы равны нулю. Таким образом, аналогично базовому гамильтониану, статсумма будет определяться выражением (3):

$$Z = \text{Tr} M^N. \quad (12)$$

И в термодинамическом пределе ($N \rightarrow \infty$) получаем $Z = \lambda_1^N$, где λ_1 – главное собственное число матрицы M .

Следует отметить, что вековое уравнение для матрицы M не столь компактно, как в (4) для матрицы G .

4. Вычисляемые параметры

4.1. Степень спиральности θ

Исходя из гамильтониана (7), как и в случае базовой модели, степень спиральности определяется следующим выражением:

$$\theta = \langle \delta_r^A \rangle = \frac{1}{2NZ} \frac{\partial Z}{\partial J}, \quad (13)$$

где в качестве трансфер-матрицы используется матрица (10), соответствующая гамильтониану (7), а в качестве степени полимеризации фигурирует общая длина двух цепей $2N$.

В термодинамическом пределе получаем

$$\theta = \frac{1}{2} \frac{\partial \ln \lambda_1}{\partial J} = \frac{1}{2\lambda_1} \frac{\partial \lambda_1}{\partial J}. \quad (14)$$

Поскольку статсумма определяется выражением (12), то для степени спиральности имеем

$$\theta = \frac{\text{Tr} M' M^{N-1}}{2Z}, \quad (15)$$

где $M' = \partial M / \partial J$.

Учитывая (11), получаем

$$M' = G' \otimes (G + (e^J - 1)G') + (G + (e^J - 1)G') \otimes G'. \quad (16)$$

Из (15), введя правые B и левые A собственные матрицы для матрицы M , получаем в термодинамическом пределе

$$\theta = \frac{\text{Tr} M' A \Lambda^{N-1} B}{2\lambda_1^N} = \frac{(BM'A)_{11}}{2\lambda_1}. \quad (17)$$

4.2. Двухчастичная корреляционная функция $g(r)$ и корреляционная длина ξ

Так как мы следуем стандартной процедуре построения и анализа статистико-механической модели, то имеем возможность и право использовать анализ корреляционных функций нашей модели при исследовании перехода спираль-клубок. В частности, двухчастичный пространственный коррелятор в нашем случае описывает взаимозависимость образования водородных связей i -ой и $(i+r)$ -ой повторяющихся единиц.

Используя выражения для статистической суммы в виде (12) и определение степени спиральности в виде (14), можно записать двухчастичный коррелятор как

$$g(r) = \langle \delta_i^A \delta_{i+r}^A \rangle - \langle \delta_i^A \rangle \langle \delta_{i+r}^A \rangle = \frac{\text{Tr} M' M^{r-1} M' M^{N-r-1}}{2Z} - \theta^2. \quad (18)$$

Введя, как и для степени спиральности правые B и левые A собственные матрицы для матрицы M , получаем в термодинамическом пределе

$$g(r) = \sum_{k=2}^{\Delta} \frac{(BM'A)_{1k}}{\lambda_1} \left(\frac{\lambda_k}{\lambda_1} \right)^{r-1} \frac{(BM'A)_{k1}}{\lambda_1}. \quad (19)$$

При достаточно больших r в выражении (19) останется лишь член с λ_2 - вторым по величине собственным значением матрицы M :

$$g(r) = \frac{(BM'A)_{12}}{\lambda_1} \frac{(BM'A)_{21}}{\lambda_1} \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^{r-1} = \text{const} \cdot \exp\left(-\frac{r}{\xi}\right). \quad (20)$$

Подобное асимптотическое поведение двухчастичной корреляционной функции при больших r характерно для одномерных систем [15] и может быть описано как экспоненциальный спад на масштабе корреляционной длины

$$\xi = \ln^{-1} \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right). \quad (21)$$

Так как мы ставим задачу исследования перехода, а не построение кривых плавления, то удобнее анализировать корреляционную длину вместо кривой плавления. Отметим, что расчет корреляционной длины из (21) является несравненно более легкой задачей по сравнению с расчетом дифференциальной кривой плавления и является величиной, имеющей ясный физический смысл. Значение корреляционной длины в максимуме несет информацию о кооперативности перехода, а температура в этой точке — о стабильности.

4.3. Доля стыков η

Этот параметр показывает долю тех участков, где за повторяющейся единицей, находящейся в спиральном состоянии, следует повторяющаяся единица, находящаяся в клубкообразном состоянии, т.е. показывает долю спиральных участков. В рамках нашей модели этот параметр η должен быть определен следующим образом:

$$\eta = \langle \delta_i^{(A)} (1 - \delta_{i+1}^{(A)}) \rangle = \langle \delta_i^{(A)} \rangle - \langle \delta_i^{(A)} \delta_{i+1}^{(A)} \rangle = \theta - \frac{\text{Tr}(BM'M'A)\Lambda^{N-2}}{2\lambda_1^N} = \theta - \frac{(BM'M'A)_{11}}{2\lambda_1^2}. \quad (22)$$

4.4. Средние длины спиральных v_h и клубкообразных v_c участков

Если общее число повторяющихся единиц в спиральном состоянии равно $N\theta$, а в клубкообразном — $N(1-\theta)$, то среднее число повторяющихся единиц, находящихся в спиральном участке, равно общему числу повторяющихся единиц, находящихся в спиральном участке, деленное на число таких участков, т.е. на число стыков, которое равно $N\eta$:

$$v_h = \frac{\theta}{\eta}. \quad (23)$$

Аналогичным способом можно определить и среднюю длину клубкообразного участка:

$$v_c = \frac{1-\theta}{\eta}. \quad (24)$$

5. Результаты и обсуждение

Рассмотрим гамильтониан (7). Для его анализа приведем параметры к полной энергии $2J+I$ и введем параметр α , определяющий долю вклада межцепочечных взаимодействий в полную энергию всех взаимодействий в гамильтониане, т.е. $\alpha = I/(2J+I)$. Тогда $(1-\alpha)/2 = J/(2J+I)$ и гамильтониан может быть преобразован к виду

$$-\beta H = (2J + I) \left(\left(\frac{1-\alpha}{2} \right) \sum_{i=1}^N \delta_i^{(\Delta)} + \left(\frac{1-\alpha}{2} \right) \sum_{j=1}^N \delta_j^{(\Delta)} + \alpha \sum_{i,j=1}^N \delta_i^{(\Delta)} \delta_j^{(\Delta)} \right). \quad (25)$$

Для более тщательного исследования перехода спираль-клубок введем следующую параметризацию. Пусть $(2J + I)/\ln Q = 1/t$. Таким образом мы вводим безразмерную температуру, причем она определяется так, чтобы точка перехода T_m была бы вблизи $t=1$. Как было показано ранее для других задач [5-12], точка перехода T_m определяется полной энергией гамильтониана U как

$$e^{\frac{U}{T_m}} = Q. \quad (26)$$

5.1. Случай $1 > \alpha > 0$

Этот случай соответствует стабилизации спиральной структуры вдоль цепи $J > 0$ и эффективному притяжению между цепями $I > 0$.

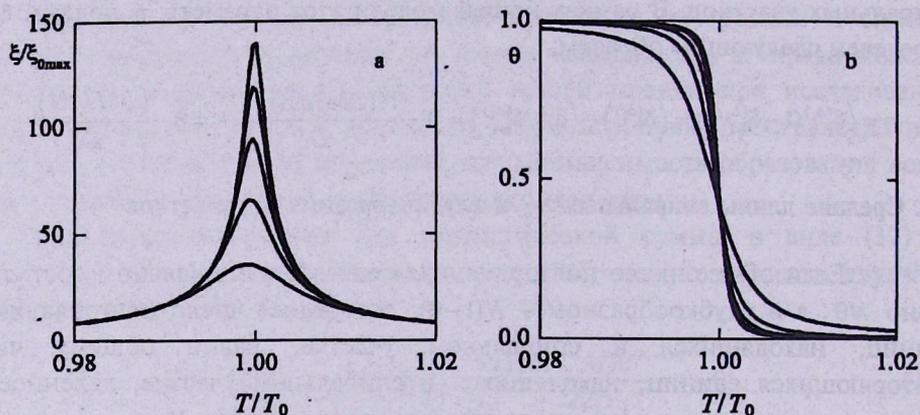


Рис. 1. а) Зависимость корреляционной длины от температуры для значений параметров $\Delta = 3$; $Q = 20$; $\alpha \in [0.1; 0.5]$. Данные представлены в приведенных единицах $\xi/\xi_{0\max}$ и T/T_0 . б) Зависимость степени спиральности от температуры для того же набора параметров и в тех же единицах.

Как показывают расчеты, графики температурной зависимости корреляционной длины ξ (рис.1а) так же, как и в случае базовой модели, являются кривыми с максимумами и с увеличением вклада межцепочечных взаимодействий в общую энергию системы растет пик корреляционной длины. Соответственно, на графиках, описывающих поведение степени спиральности θ (рис.1б), переход происходит с все меньшим интервалом плавления. Следует отметить, что температурное положение максимума для ξ и точки перехода для θ не зависит от α . Таким образом, точка перехода для данного случая определяется соотношением (26). Как показывают расчеты, это соотношение тем вернее, чем больше величина Q .

5.2. Случай $\alpha < 0$.

Этот случай соответствует стабилизации спиральной структуры вдоль цепи $J > 0$ и эффективному отталкиванию между цепями $I < 0$.

Как показывают расчеты, графики температурной зависимости корреляционной длины ξ так же, как и в случае базовой модели, являются кривыми с максимумами и с увеличением вклада межцепочечных отталкиваний в общую энергию системы, т.е. с уменьшением α , растет пик корреляционной длины. Однако, в отличие от случая $1 > \alpha > 0$, кривые обнаруживают наряду с ростом пика также и значительное уширение, как это показано на рис.2а. Таким образом, при наличии межцепочечного отталкивания изменение корреляционной длины происходит в более широком температурном интервале, чем в случае притяжения. Еще более яркие отличия показывает поведение степени спиральности. Как показано на рис.2б, с увеличением вклада межцепочечных отталкиваний в общую энергию системы, т.е. с уменьшением α кривые денатурации становятся двухступенчатыми, причем ширина ступеньки растет с уменьшением α . Такое поведение степени спиральности θ объясняется дестабилизацией контактов hh по сравнению с hc ; таким образом, система начинает плавиться при более низкой температуре до тех пор, когда напротив спирального состояния будет всегда клубкообразное, а это соответствует $\theta = 1/2$. Дальнейшее плавление приводит к увеличению числа контактов cc по отношению с hc , что, естественно, происходит при большей температуре. Сопоставление температурного поведения ξ и θ показывает, что в температурном интервале, где $\theta = 1/2$, наблюдается значительный рост корреляционной длины. Для выяснения того, какие процессы приводят к корреляциям при постоянной степени спиральности были вычислены средние доли стыков η (рис.3а) и средние длины спиральных участков v_h (рис.3б).

Из рисунков видно, что поведение η является двухэтапным и каждый этап подобен базовой модели. Пики поведения η соответствуют полупереходу на графике поведения θ , а в точке перехода базовой модели η проходит через минимум. Именно это наличие минимума приводит к такому поведению средней длины спирального участка, как изображено на рис.3б. На первом этапе плавления наблюдается быстрый спад v_h , как и в базовой модели, но при более низкой температуре. В дальнейшем, на протяжении температурного интервала, когда $\theta = 1/2$, наблюдается колоколообразное изменение v_h , после чего продолжается спад, как и в базовой модели.

Таким образом, при $\alpha < 0$ однородная система плавится в два этапа, причем постоянному значению степени спиральности $\theta = 1/2$ сопутствуют большие корреляции, связанные со слиянием и распадом спиральных участков.

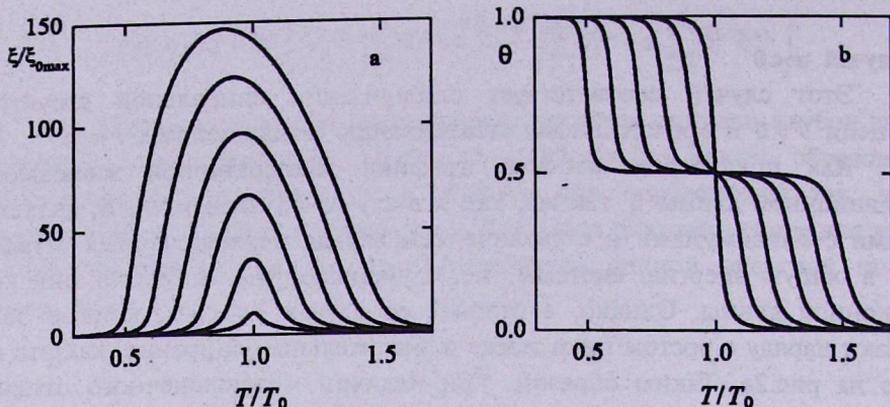


Рис.2. а) Зависимость корреляционной длины от температуры для значений параметров $\Delta=3$; $Q=20$; $\alpha \in [-0.5; 0]$. Данные представлены в приведенных единицах ξ/ξ_{0max} и T/T_0 . б) Зависимость степени спиральности от температуры для того же набора параметров и в тех же единицах.

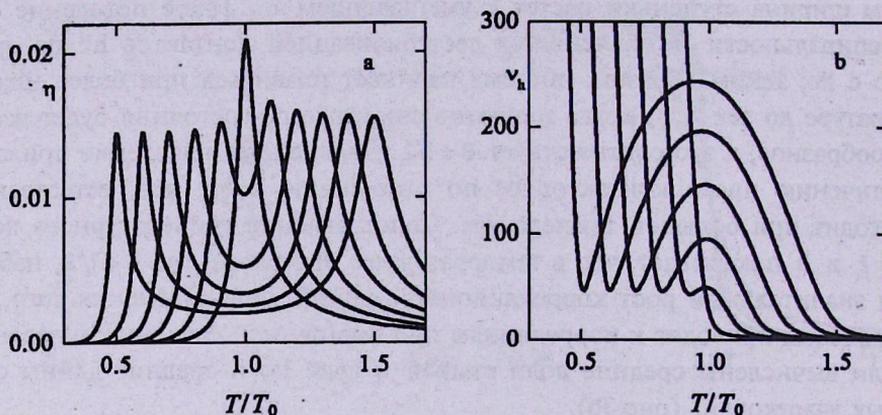


Рис.3. а) Зависимость доли стыков от приведенной температуры для значений параметров $\Delta=3$; $Q=20$; $\alpha \in [-0.5; 0]$. б) Зависимость средней длины спирального участка от приведенной температуры для того же набора параметров.

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Skolnick, A. Holtzer. *Macromolecules*, 15, 303 (1982).
2. А.С. Костюкова. *Усп. биол. химии*, 42, 217 (2002).
3. L.S. Tobacman. *Ann.Rev.Physiol.*, 58, 447 (1996).
4. E. Kremneva, R. Maytun, O. Nikolaeva, D. Levitsky, M. Geeves. *J. Muscle Res. and Cell Motil.*, 25, 259 (2004).
5. Ш.А. Тоноян, Т.Ю. Бурякина, А.В. Царукян, Е.Ш. Мамасакхлисов, В.Ф. Морозов. *Изв. НАН Армении, Физика*, 42, 466 (2007).
6. N.S. Apanikyan, Sh.A. Hairyan, E.Sh. Mamasakhlov, V.F. Morozov. *Biopolymers*, 30, 375 (1990).
7. Sh.A. Hairyan, E.Sh. Mamasakhlov, V.F. Morozov. *Biopolymers*, 35, 75 (1995).

8. V.F. Morozov, A.V. Badasyan, A.V. Grigoryan, M.A. Sahakyan, E.Sh. Mamasakhlisov. *Biopolymers*, 75, 434 (2004).
9. A.V. Badasyan, A.V. Grigoryan, E.Sh. Mamasakhlisov, A.S. Benight, V.F. Morozov. *J. Chem. Phys.*, 123, 194701 (2005).
10. V.F. Morozov, A.V. Badasyan, A.V. Grigoryan, M.A. Sahakyan, E.Sh. Mamasakhlisov. *Mod. Phys. Lett. B*, 19, 79 (2005).
11. А.В. Бадасян, А.В. Григорян, А.Ю. Чухаджян, Е.Ш. Мамасахлисов, В.Ф. Морозов. *Изв. НАН Армении, Физика*, 37, 320 (2002).
12. Е.Ш. Мамасахлисов, А.В. Бадасян, В.Ф. Морозов *Изв. НАН Армении, Физика*, 40, 111 (2005).
13. D.C. Poland, H.A. Sheraga. *The Theory of Helix-Coil Transition*. New York, Acad. Press, 1970.
14. Ф.П. Гантмахер. *Теория матриц*. М.—Л., Гостехиздат, 1953.
15. R.J. Baxter. *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. London, Academic, 1982.

**ՊԱՐՈՒՅՐ-ԿՇԻԿ ԱՆՑՈՒՄՆԵՐԸ ԵՐԿՈՒ ԸՂԹԱՆԵՐԻ ՄԻՋԵՎ
ՓՈՒԱԶԻԵՑՈՒԹՅԱՆ ԱՌԿԱՅՈՒԹՅԱՆ ԴԵՊԸՈՒՄ**

Ա.Վ. ԾԱՌՈՒԿՅԱՆ, Ը.Ա. ՏՈՆՈՅԱՆ, Գ.Ն. ՀԱՅՐԱՊԵՏՅԱՆ,
Ի.Վ. ԲԱԳԴՅԱՆ, Ե.Շ. ՄԱՍԱՍԱԽԼԻՍՈՎ, Վ.Ֆ. ՄՈՐՈԶՈՎ

Պոլիպեպտիդային շղթայի ընդհանրացված մոդելի հիման վրա դիտարկված են պարույր-կծիկ անցումները երկու շղթաներում, որոնք փոխազդում են կողք-կողքի, ընդ որում գոյություն ունեն չորս տեսակի փոխազդեցություններ (hh, hc, ch, cc): Համակարգի համիլտոնյանը իր մեջ է ներառում ՊԸԸՄ-ի բազային համիլտոնյանները երկու շղթաների համար և անդամ, որը պայմանավորված է փոխազդեցություններով: Ցույց է տրված, որ մույնատիպ (hh, cc) փոդազդեցության էներգիայի գերակշռումը խառը (hc, ch) տիպի փոխազդեցության էներգիայի նկատմամբ հանգեցնում է կոռելյացիոն երկարության կտրուկ աճին և հալման միջակայքի նվազմանը: Համակարգի ոչ տրիվյալ պահվածք է դիտվում հակառակ դեպքում, երբ գերակշռում է խառը տիպի (hc, ch) փոխազդեցության էներգիան մույնատիպ (hh, cc) փոխազդեցության էներգիայի նկատմամբ: -

**HELIX-COIL TRANSITIONS IN THE CASE OF INTERACTION
BETWEEN TWO CHAINS**

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

Based on the generalized model of polypeptide chain the helix-coil transition in two chains, which are interacting abreast, is studied. There are four types of interaction (hh, hc, ch, cc). The Hamiltonian of system includes the basic Hamiltonian for two chains and the term which is responsible for interactions. It is shown that, when the energy of one type interaction (hh, cc) is more than the energy of mixed-type interaction (hc, ch), the correlation length grows sharply and melting interval becomes narrower. The system has a nontrivial behavior when the energy of mixed-type interactions (hc, ch) is higher than that of the one-type interaction (hh, cc). In this case one can observe the growth of the correlation length, and the melting curve has a two-stage character. The portion of junctions and the average length of helical fractions show that the merging and breakup of helical fractions take place.

ԲՈՎԱՆԴԱԿՈՒԹՅՈՒՆ

Ա.Խ.Մանասեյան, Ա.Վ.Ղազարյան, Ա.Ա.Կիրակոսյան. Մագնիսական խառնուկի ազդեցությունը ZnSe գնդային քվանտային կետի օպտիկական հատկություն-ների վրա. 327

Վ.Ա.Հարությունյան, Ս.Լ.Հարությունյան, Գ.Հ.Դեմիրճյան, Ն.Հ.Գասպարյան. Օպտիկական կլանումը կիսահաղորդչային նանոգլանային շերտում. 336

Վ.Ա.Սահակյան. Սիլիցիումային կիսահաղորդչային սարքերի պարամետրերի վրա տարբեր ճառագայթահարումների ազդեցությունը. 348

Ա.Ս.Վորա. Անցումային մետաղների երկակի ձուլվածքների գերհաղորդիչ վիճակի պարամետրերը կախված էկրանավորումից. 355

Ա.Հ.Շահինյան. Փոխանցված իմպուլսի մեծ արժեքների երկմասնիկային էքսկյուզիվ ռեակցիաների հետազոտման սարքի յուրահատկությունները. 364

Է.Հ.Ալեքսանյան, Է.Մ.Լազիև, Մ.Լ.Մովսիսյան. ԵրՏԻ-ի 20 ՄԷՎ էլեկտրոնների գծային արագացուցիչի հիման վրա տերահերցային տիրույթի ազատ էլեկտրոններով լազերների դրայվեր. 375

Ա.Ա.Հովհաննեսյան, Գ.Կ.Գրիգորյան, Ա.Վ.Աթանեսյան. Լիթիումի յոդատի պրոֆի-լավորած միաբյուրեղների աճեցումը պոլիմերային նանոմասնիկների կաղա-պարային կառուցվածքի օգնությամբ. 383

Ա.Վ.Ծառուկյան, Շ.Ա.Տնտյան, Գ.Ն.Հայրապետյան, Ի.Վ.Բաղդյան, Ե.Շ.Մամասախ-լիսով, Վ.Ֆ.Մորոզով. Պարույր-կծիկ անցումները երկու շղթաների միջև փոխազդեցության դեպքում. 387

CONTENTS

A.Kh.Manaselyan, A.V.Ghazaryan, A.A.Kirakosyan. Effect of a magnetic impurity on the optical properties of a spherical ZnSe quantum dot. 327

V.A.Harutyunyan, S.L.Harutyunyan, G.H.Demirjyan, N.H.Gasparyan. Optical absorption in a semiconductor cylindrical nanolayer. 336

V.A.Sahakyan. Influence of different type irradiation on the parameters of silicon semiconductor devices. 348

A.M.Vora. Screening-dependent superconducting state parameters of transition metals-based binary alloys 355

A.S.Shahinyan. Features of the setup for investigation of two-particle exclusive reactions with high transfer momentum. 364

E.O.Aleksanyan, E.M.Laziev, M.L.Movsisyan. Driver of THz-FELs based on the YerPhi 20 MeV linear accelerator. 375

A.A.Hovhannesian, G.K.Grigoryan, A.K.Atanesian. Growth of profiled single crystals of lithium iodate using a sharper from polymeric nanoparticles. 383

A.V.Tsarukyan, Sh.A.Tonoyan, G.N.Hayrapetyan, I.V.Baghdyan, Y.Sh.Mama-sakhlov, V.F.Morozov. Helix-coil transitions in the case of interaction between two chains.387

СОДЕРЖАНИЕ

А.Х.Манаселян, А.В.Казарян, А.А.Киракосян. Влияние магнитной примеси на оптические свойства сферической квантовой точки ZnSe.	327
В.А.Арутюнян, С.Л.Арутюнян, Г.О.Демирчян, Н.Г.Гаспарян. Оптическое поглощение в полупроводниковом наноцилиндрическом слое.	336
В.А.Саакян. Действие различных видов облучения на параметры кремниевых полупроводниковых приборов.	348
А.М.Вора. Зависящие от экранирования параметры сверхпроводящего состояния бинарных сплавов переходных металлов.	355
А.А.Шагинян. Особенности установки для исследования двухчастичных эксклюзивных реакций при больших переданных импульсах.	364
Э.О.Алексян, Э.М.Лазиев, М.Л.Мовсисян. Драйвер терагерцовых ЛСЭ на базе 20 МэВ-ного линейного ускорителя электронов ЕрФИ.	375
А.А.Оганесян, Г.К.Григорян, А.К.Атанесян. Выращивание профилированных монокристаллов йодата лития с помощью формообразователя из полимерных наночастиц.	383
А.В.Царукян, Ш.А.Тоноян, Г.Н.Айрапетян, И.В.Багдян, Е.Ш.Мамасакхлисов, В.Ф.Морозов. Переход спираль-клубок при наличии взаимодействия между двумя цепями.	387

Заказ №214

Тираж 100. Сдано в набор 27.05.2008.

Подписано к печати 17.06.2008. Печ. л. 4.75.

Бумага офсетная. Цена договорная.

Типография НАН РА.

Ереван, пр. Маршала Баграмяна, 24.